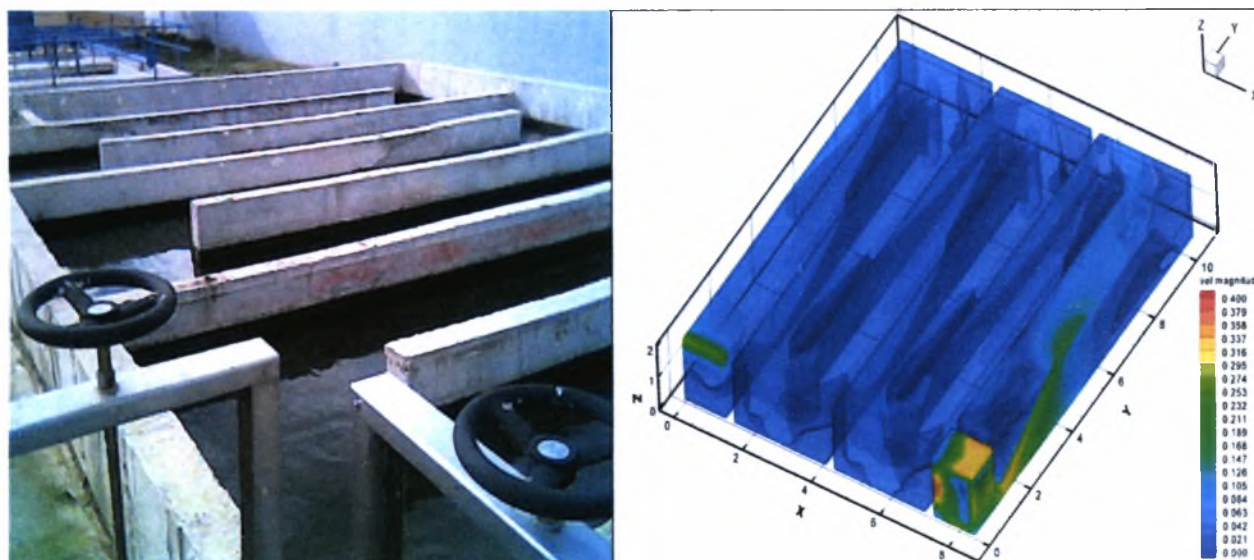


ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
Πολυτεχνική Σχολή
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ
Τομέας Ενέργειας, Βιομηχανικών Διεργασιών & Τεχνολογίας Περιβάλλοντος

Εργαστήριο Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών
Μονάδα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής

**Προσομοίωση Ροής & Φαινομένων Μεταφοράς σε
Δεξαμενή Χλωρίωσης Δευτεροβάθμια Επεξεργασμένων Αστικών Λυμάτων
με Υπολογιστική Ρευστοδυναμική – Έλεγχος Κινητικών Μοντέλων**



Μεταπτυχιακή Εργασία

Ζαγορίτης Γ. Αχιλλέας - Διπλ. Χημικός Μηχανικός Α.Π.Θ.

Επιβλέπων Καθηγητής : Δρ. Νικόλαος Βλάχος

Απρίλιος 2007



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.:	5284/1
Ημερ. Εισ.:	27-04-2007
Δωρεά:	Συγγραφέα
Ταξιθετικός Κωδικός:	Δ
	628.1
	ZAG

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ.....	6
1. ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΚΑΙ ΣΤΟΧΟΙ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ.....	8
1.1. Εισαγωγή	8
1.2. Δομή της εργασίας	9
2. ΕΓΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑΣ ΑΣΤΙΚΩΝ ΛΥΜΑΤΩΝ.....	13
2.1. Στάδια στην επεξεργασία των λυμάτων.....	13
2.2. Χαρακτηριστικά των ανεπεξέργαστων αστικών λυμάτων	17
2.2.1. Φυσικά χαρακτηριστικά	18
2.2.2. Χημικά χαρακτηριστικά.....	19
2.2.3. Παθογόνοι μικροοργανισμοί	21
2.3. Θεσμικό πλαίσιο – Η κατάσταση στον Ελλαδικό χώρο	22
3. ΘΕΩΡΙΑ ΤΗΣ ΑΠΟΛΥΜΑΝΣΗΣ	26
3.1. Μέθοδοι και μέσα απολύμανσης.....	26
3.2. Χαρακτηριστικά του ιδανικού απολυμαντικού.....	27
3.3. Μηχανισμοί απολύμανσης.....	29
3.4. Παράγοντες που επηρεάζουν τη διεργασία της απολύμανσης	30
3.4.1. Χρόνος επαφής	31
3.4.2. Συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου.....	32
3.4.3. Ένταση και φύση του φυσικού παράγοντα απολύμανσης.....	35
3.4.4. Συγκέντρωση και είδος των μικροοργανισμών.....	35
3.4.5. Θερμοκρασία	36
3.4.6. Φύση του υγρού.....	37
4. ΧΗΜΕΙΑ ΧΛΩΡΙΩΣΗΣ ΑΣΤΙΚΩΝ ΛΥΜΑΤΩΝ	38
4.1 Μορφές χλωρίου.....	38
4.2. Χημεία της χλωρίωσης.....	40
4.2.1. Ελεύθερο χλώριο	40

4.2.2. Ενωμένο χλώριο	43
4.2.3. Σημείο θραύσης χλωρίωσης.....	44
4.3. Μηχανισμός της απολυμαντικής δράσης του χλωρίου.....	47
4.4. Σύγκριση της μικροβιοκτόνου δράσης των διαφόρων μορφών του χλωρίου	48
4.5. Απαίτηση σε χλώριο – Ο κανόνας $C * t$	50
4.6. Διαμόρφωση δεξαμενών επαφής	52
4.7. Ολοκληρωμένος σχεδιασμός δεξαμενών χλωρίωσης.....	53
 5. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ	55
5.1. Εισαγωγή	55
5.2 Βασικές εξισώσεις της ροής των ρευστών.....	57
5.2.1 Εξίσωση συνέχειας και ορμής.....	57
5.2.2. Βασικές έννοιες τυρβώδους ροής.....	59
5.3. Παρουσίαση των κυριότερων μοντέλων τύρβης.....	64
5.3.1. Κατηγοριοποίηση μοντέλων τύρβης	64
5.3.2. Μοντέλο μηδενικής εξίσωσης.....	66
5.3.3. Μοντέλο μίας εξίσωσης	67
5.3.4. Μοντέλα δύο εξισώσεων.....	68
5.3.5. Μοντέλο τάσεων Reynolds	71
5.4. Μοντελοποίηση αντιδραστήρων εμβολικής ροής.....	72
5.4.1. Εισαγωγή	72
5.4.2. Μοντελοποίηση ιδανικής ροής	72
5.4.3. Μοντελοποίηση μη- ιδανικής ροής.....	73
5.5. Μοντέλα μεταφοράς συστατικού.....	76
5.5.1. Εξίσωση μεταφοράς ιχνηθέτη σε μία διάσταση.....	76
5.5.2. Εξίσωση μεταφοράς συστατικού σε τρεις διαστάσεις.....	78
5.6. Μοντέλα κινητικής απενεργοποίησης των μικροοργανισμών	82
5.6.1. Ιστορική αναδρομή	82
5.6.2. Σύνοψη μοντέλων κινητικής απενεργοποίησης μικροοργανισμών	84
5.7. Μοντέλα κινητικής απομείωσης του χλωρίου.....	96
 6. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ	104
6.1. Γενικά.....	104
6.2. Αριθμητικοί μέθοδοι επίλυσης	106

6.2.1. Αποσυζευκτική μέθοδος επίλυσης (segregated solution method).....	106
6.2.2. Συζευγμένη μέθοδος επίλυσης (coupled solution method).....	107
6.3. Τεχνικές διακριτοποίησης.....	108
6.3.1 Μέθοδος πεπερασμένων όγκων (finite volume method, FVM).....	109
6.4. Σχήματα διακριτοποίησης	115
6.4.1. Ιδιότητες σχημάτων διακριτοποίησης	116
6.4.2. Απλό σχήμα ανάντη διακριτοποίησης - UDS	119
6.4.3. Σχήμα διακριτοποίησης Power Law	121
6.4.4. Σχήμα διακριτοποίησης κεντρικών διαφορών - CDS	122
6.4.5. Σχήμα υβριδικής ανάντη διακριτοποίησης - HDS.....	123
6.4.6. Σχήμα διακριτοποίησης ανάντη δευτέρας τάξης (SOU)	124
6.4.7. Σχήμα διακριτοποίησης QUICK.....	125
6.4.8. Σχήμα διακριτοποίησης MUSCL.....	128
6.5. Υποχαλάρωση (Underrelaxation).....	129
6.6. Αλγόριθμοι σύζευξης ορμής - πίεσης	129

7. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΡΟΗΣ ΔΕΞΑΜΕΝΩΝ ΧΛΩΡΙΩΣΗΣ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΔΙΔΙΑΣΤΑΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ	137
7.1. Βιβλιογραφική ανασκόπηση	137
7.2. Παρουσίαση αποτελεσμάτων πρόσφατων ερευνών	139

8. ΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΣΕ ΔΥΟ & ΤΡΕΙΣ ΔΙΑΣΤΑΣΕΙΣ – ΕΛΕΓΧΟΣ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ	153
8.1. Συνοπτική περιγραφή λειτουργίας δεξαμενής χλωρίωσης	153
8.2. Γεωμετρικά χαρακτηριστικά της δεξαμενής χλωρίωσης	155
8.3. Παρουσίαση του 2D & 3D πλέγματος της υπό εξέταση γεωμετρίας.....	156
8.3.1. Σχήματα πλέξης.....	156
8.3.2. Πλέγματα προσομοιώσεων παρούσας εργασίας.....	158
8.4. Πορεία επίλυσης.....	160
8.5. Αποτελέσματα - Συζήτηση	161
8.5.1. Διδιάστατη θεώρηση	162
8.5.2. Εφαρμογή του μοντέλου σε τρεις διαστάσεις (Υδροδυναμική ανάλυση).....	169
8.5.3. Εφαρμογή του μοντέλου σε τρεις διαστάσεις (Ελεγχος κινητικών μοντέλων).....	174

9. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ	189
9.1. Συμπεράσματα.....	189
9.2. Προτάσεις για μελλοντική διερεύνηση	193
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	195

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Σε μια εποχή που τα προβλήματα που απασχολούν την ανθρωπότητα είναι ολοένα και πιο περίπλοκα, οι μηχανικοί καλούνται να δώσουν απαντήσεις για να καλύψουν τις αυξανόμενες τεχνολογικές ανάγκες που δημιουργεί η ανάπτυξη. Στη μηχανική, εξαιτίας της πολυπλοκότητας των προβλημάτων που πρόκειται να επιλυθούν, η κλασική προσέγγιση βασίζεται κυρίως σε σφαιρική επίλυση των εξισώσεων που διέπουν τα φαινόμενα ροής και μεταφοράς. Η σφαιρική αυτή προσέγγιση οδηγεί σε απλές έννοιες που επιβεβαιώνονται στην ανάλυση συγκεκριμένου εξοπλισμού. Το κύριο πλεονέκτημα της προσέγγισης αυτής είναι η απλότητα και η ευρεία χρησιμότητά της. Ωστόσο, τέτοιου είδους σχέσεις είναι εμπειρικές και είναι δύσκολο να εξάγουν συμπεράσματα. Η συνεχώς αυξανόμενη υπολογιστική ισχύς οδήγησε στην καθιέρωση της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) ως ένα αποτελεσματικό εργαλείο στην ανάλυση της συμπεριφοράς του σύνθετου εξοπλισμού. Η υπολογιστική ρευστοδυναμική βασίζεται γενικά στην αριθμητική επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων οι οποίες περιγράφουν την διατήρηση μάζας, ορμής και ενέργειας.

Η υπολογιστική ρευστοδυναμική δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να ξεκινήσει την αριθμητική του διεργασία και να καταγράψει τα αποτελέσματά του ακριβώς με τον ίδιο τρόπο που αναλύεται η ροή εργαστηριακά. Το πλεονέκτημα του χρήστη είναι ο πλήρης έλεγχος των παραμέτρων που υπεισέρχονται στον υπολογισμό της ροής, το οποίο δεν είναι πάντοτε εφικτό στο εργαστήριο. Επιπλέον, μετά την ωρίμανση και την επαλήθευση του μοντέλου του, μπορεί να “διεξάγει” παραμετρικές μελέτες και να καταγράψει τις όποιες επιδράσεις, με τεράστια οφέλη για τον σχεδιασμό διεργασιών.

Ένα από τα σοβαρότερα προβλήματα που έχει να αντιμετωπίσει σήμερα κάθε σύγχρονη κοινωνία είναι συνεχής παραγωγή στερεών και υγρών αποβλήτων καθώς επίσης και αέριων ρύπων. Τα υγρά απόβλητα αποτελούν το νερό που προέρχεται μετά από τη χρήση του σε ποικίλες εφαρμογές της κοινωνίας. Τα τελευταία χρόνια τα έργα αποχέτευσης και επεξεργασίας αστικών λυμάτων, αποτελούν μέρος της συνολικής κοινωνικής προσπάθειας για τη λήψη άμεσων και δραστικών μέτρων κατά της ραγδαία αυξανόμενης ρύπανσης του περιβάλλοντος. Το τελικό στάδιο πριν την διάθεση των επεξεργασμένων αποτελεί η απολύμανση η οποία αποσκοπεί στην καταστροφή των παθογόνων μικροοργανισμών των λυμάτων ώστε να αποφεύγεται η μετάδοση ασθενειών μέσω του νερού του αποδέκτη. *Η υπολογιστική προσέγγιση της διεργασίας της χλωρίωσης αποτελεί αντικείμενο της παρούσας μεταπτυχιακής, με σκοπό την κατανόηση της αρχής λειτουργίας και την βελτίωση όλων εκείνων των χαρακτηριστικών που επηρεάζουν την απόδοσή της.*

Στην προσπάθεια αυτή είχα αρωγούς όλη την ομάδα του Εργαστηρίου Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών. Συγκεκριμένα, δεν μπορώ να μην αναφερθώ στην βοήθεια και την καθοδήγηση του επιβλέποντος καθηγητή μου κ. Νικόλαο Βλάχο. Επίσης, το σύγγραμμα αυτό έχει ωφεληθεί σημαντικά από τις γνώσεις και τις επικοινωνιακές υποδείξεις του υποψήφιου διδάκτορα Δημ. Φείδαρο και της επιστημονικής συνεργάτιδας του Εργαστηρίου Δρ. Αικ. Μπαξεβάνου. Τέλος, δε θα μπορούσα να αγνοήσω την ηθική συμπαράσταση των γονιών μου και να τονίσω πως χωρίς την συμβολή των παραπάνω η εργασία αυτή δεν θα είχε ολοκληρωθεί.

1. ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΚΑΙ ΣΤΟΧΟΙ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

1.1. Εισαγωγή

Στην παρούσα Μεταπτυχιακή εργασία γίνεται μια προσέγγιση και επίλυση ενός τεχνολογικού προβλήματος με τη χρήση υπολογιστικών μεθόδων. Το αντικείμενο αφορά την μελέτη των φαινομένων ροής και μεταφοράς που λαμβάνουν χώρα σε μια δεξαμενή χλωρίωσης (δεξαμενή επαφής), για την απολύμανση των δευτεροβάθμια επεξεργασμένων αστικών λυμάτων.

Η απολύμανση αναφέρεται στην μερική καταστροφή των παθογόνων οργανισμών, εμποδίζοντας έτσι την μετάδοση ασθενειών μέσω των νερών του αποδέκτη. Η πλέον διαδομένη μέθοδος απολύμανσης υπήρξε και εξακολουθεί να είναι η χλωρίωση σε δεξαμενές επαφής (μαιανδρική κάτοψη). Ο σχεδιασμός των δεξαμενών αυτών εξακολουθεί ακόμη και στις μέρες μας να είναι καθαρά εμπειρικός βασιζόμενος σε κριτήρια όπως ο χρόνος επαφής και η ελάχιστη επιθυμητή συγκέντρωση χλωρίου για την επίτευξη μιας συγκεκριμένης απομείωσης μικροοργανισμών καθώς επίσης και στη θεώρηση επίτευξης ιδανικής εμβολικής ροής.

Η χρήση διαχωριστικών τοιχίων καθώς και η διαμόρφωση της εισόδου και της εξόδου της δεξαμενής επαφής συντελούν στην ανάπτυξη μιας σύνθετης ροής όπου παρατηρούνται φαινόμενα τυρβώδους ανάμιξης, νεκρών ζωνών και ανακυκλοφοριών. Η αναποτελεσματική χρήση του χλωρίου οδηγεί στο σχηματισμό πιθανών καρκινογόνων ενώσεων, ως προϊόντα του υπολειμματικού χλωρίου στη δεξαμενή ή σε ελλιπή απολύμανση τμήματος της εισερχόμενης ροής με αποτέλεσμα τα χαρακτηριστικά της εκροής να μην είναι σύμφωνα με τις τιθέμενες προδιαγραφές. Συνεπώς, η κατανόηση της υδροδυναμικής των δεξαμενών χλωρίωσης είναι απαραίτητη για τον ορθό σχεδιασμό και τον περιορισμό των προαναφερόμενων αστοχιών.

Για την κατανόηση των μηχανισμών της ροής, της κινητικής απενεργοποίησης των μικροοργανισμών και της κινητικής απομείωσης του απολυμαντικού μέσου καθώς και της μεταφοράς – διάχυσης του χλωρίου και της μεταφοράς – απενεργοποίησης των μικροοργανισμών στη δεξαμενή, χρησιμοποιήθηκε ένας εμπορικός κώδικας υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (Fluent), ο οποίος παρέχει την δυνατότητα εφαρμογής επιμέρους μαθηματικών μοντέλων, ώστε να καθίσταται δυνατή η μελέτη των φαινομένων ροής και μεταφοράς στην προαναφερόμενη διάταξη.

Οι στόχοι που ετέθησαν κατά την εκπόνηση αυτής της εργασίας διακρίθηκαν σε τέσσερα επίπεδα. **Στο πρώτο επίπεδο, ο στόχος** ήταν η συνοπτική παρουσίαση της φύσης (χαρακτηριστικών) των αστικών λυμάτων και η παρουσίαση (θεωρητική ανάλυση) των εναλλακτικών μεθόδων απολύμανσης αυτών. Δόθηκε έμφαση στην χλωρίωση των αστικών λυμάτων, με περιγραφή της χημείας της χλωρίωσης. **Ο δεύτερος στόχος** ήταν η ανάπτυξη των απαραίτητων μαθηματικών μοντέλων για την προσομοίωση των φαινομένων ροής και μεταφοράς στις δεξαμενές χλωρίωσης. **Ο τρίτος στόχος** ήταν η εκμάθηση του εμπορικού κώδικα Fluent. **Σε τέταρτο επίπεδο ο στόχος** ήταν η εφαρμογή των μοντέλων που αναπτύχθηκαν και του κώδικα στην επίλυση του προαναφερθέντος τεχνολογικού προβλήματος (χλωρίωση δευτεροβάθμια επεξεργασμένων αστικών λυμάτων σε μαιανδρική δεξαμενή χλωρίωσης συγκεκριμένης γεωμετρίας) καθώς και η εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων βασισμένων σε θεμελιώδεις αρχές.

1.2. Δομή της εργασίας

Στο Κεφάλαιο 2, γίνεται συνοπτική περιγραφή των διεργασιών και των τεχνολογιών που χρησιμοποιούνται στην επεξεργασία των αστικών λυμάτων με συνοπτική περιγραφή των κυριότερων φυσικών, χημικών και βιολογικών σταδίων επεξεργασίας. Στη συνέχεια γίνεται αναφορά, στα κυριότερα χημικά, φυσικά και βιολογικά χαρακτηριστικά των αστικών λυμάτων. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στην παρουσίαση των κυριότερων παθογόνων μικροοργανισμών που συναντώνται στα λύματα καθώς η διεργασία της απολύμανσης σχετίζεται με την μερική καταστροφή αυτών. Στο τέλος του κεφαλαίου αυτού, παρουσιάζεται το θεσμικό πλαίσιο που διέπει την επεξεργασία αστικών λυμάτων αλλά και τις απαιτήσεις για απολύμανση στον Ελλαδικό χώρο, όπως αυτό διαμορφώθηκε από την εναρμόνισή του με τις Κοινοτικές οδηγίες.

Στο Κεφάλαιο 3, περιγράφονται και συγκρίνονται οι εναλλακτικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται σήμερα για την απολύμανση των αστικών λυμάτων, με ανάλυση των κυριότερων χαρακτηριστικών του ιδανικού απολυμαντικού. Επεξηγείται επίσης ο μηχανισμός δράσης του απολυμαντικού μέσου, ενώ παράλληλα αναλύονται οι παράγοντες που επηρεάζουν τη διεργασία της απολύμανσης.

Το Κεφάλαιο 4, πραγματεύεται τη χλωρίωση των αστικών λυμάτων. Πιο αναλυτικά, παρουσιάζονται οι εναλλακτικές μορφές του χλωρίου και αναλύεται εκτενώς η χημεία της χλωρίωσης με σκοπό την κατανόηση του μηχανισμού δράσης του χλωρίου. Στην ενότητα

αυτή καθορίζονται επίσης οι παράμετροι που επιβάλλεται να μελετηθούν σε βάθος για έναν ολοκληρωμένο και άρτιο σχεδιασμό των δεξαμενών χλωρίωσης.

Στο Κεφάλαιο 5, περιγράφεται το μαθηματικό μοντέλο της προσομοίωσης. Στην αρχή του κεφαλαίου δίνονται οι θεμελιώδεις εξισώσεις που διέπουν τη ροή των ρευστών και γίνεται εισαγωγή στις βασικές έννοιες της τυρβώδους ροής με παρουσίαση των χρονικά μέσων εξισώσεων Navier – Stokes (RANS). Στη συνέχεια αναλύονται τα κυριότερα μοντέλα της τύρβης, που χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των τυρβωδών τάσεων, με έμφαση στο k-ε μοντέλο, το οποίο έχει επιτυχώς χρησιμοποιηθεί σε ανάλογες εργασίες προσομοίωσης δεξαμενών χλωρίωσης. Αναλύονται και διαχωρίζονται οι έννοιες διάχυσης και διασποράς, με σκοπό την εξαγωγή της εξίσωσης μεταφοράς-απομείωσης του χλωρίου και της εξίσωσης μεταφοράς – απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Επιπλέον, παρουσιάζονται εκτενώς τα κυριότερα μοντέλα που έχουν αναπτυχθεί για την περιγραφή της κινητικής αδρανοποίησης των παθογόνων μικροοργανισμών που εμπεριέχονται στα αστικά λύματα, καθώς και των μοντέλων που έχουν προταθεί για την περιγραφή της κινητικής απομείωσης της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου (χλώριο). Τα τελευταία, χρησιμοποιήθηκαν για την εξαγωγή των εξισώσεων μεταφοράς (συναγωγής) – διάχυσης του χλωρίου στη δεξαμενή χλωρίωσης και της εξίσωσης μεταφοράς (συναγωγής) – διάχυσης των μικροοργανισμών (όροι καταβόθρας στις προαναφερόμενες εξισώσεις).

Το Κεφάλαιο 6, εστιάζεται στην παρουσίαση των αριθμητικών τεχνικών, που χρησιμοποιούνται στην επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDE's) που απαρτίζουν το μαθηματικό μοντέλο. Πιο αναλυτικά, ο εμπορικός κώδικας υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Fluent, που χρησιμοποιήθηκε, δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να επιλέξει μεταξύ ενός αριθμού σχημάτων διακριτοποίησης. Θεωρήθηκε λοιπόν σκόπιμο στο κεφάλαιο αυτό να γίνει μια σύνοψη, που επιτρέπει στον αναγνώστη να κατανοήσει τις βασικές έννοιες του τεράστιου και σύνθετου πεδίου της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, παρουσιάζοντας παράλληλα το υπόβαθρο για την επιλογή των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτή την εργασία. Έτσι, παρουσιάστηκαν οι αριθμητικοί μέθοδοι επίλυσης (αποσυζευγμένη και συζευγμένη), οι τεχνικές διακριτοποίησης με έμφαση στη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων που χρησιμοποιεί ο κώδικας Fluent και τα κυριότερα σχήματα διακριτοποίησης, ενώ στο τέλος του κεφαλαίου γίνεται αναφορά και σύγκριση των εναλλακτικών αλγόριθμων σύζευξης των εξισώσεων ορμής – πίεσης.

Στο Κεφάλαιο 7, γίνεται αρχικά μια συνοπτική παρουσίαση των βιβλιογραφικών αναφορών σχετικά με την εκτίμηση του πεδίου της ροής της διεργασίας της απολύμανσης σε δεξαμενές επαφής, με τη χρήση αριθμητικών μοντέλων. Στη συνέχεια του κεφαλαίου, γίνεται

μια πιο εκτενής ανάλυση των αποτελεσμάτων και των συμπερασμάτων που προέκυψαν από πρόσφατες εργασίες προσομοίωσης της ροής και των φαινομένων μεταφοράς δεξαμενών χλωρίωσης, με τη χρήση κατά κύριο λόγο ενός μέσου-βάθους (depth-average) διδιάστατου μοντέλου. Ο σκοπός της παρουσίασης αυτής είναι η εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων που θα αποτελέσουν την βάση για τη δική μας παραμετρική ανάλυση. *Το κεντρικό συμπέρασμα που εξάγεται από την βιβλιογραφική αυτή ανασκόπηση είναι ότι η ροή σε τέτοιου είδους δεξαμενές επαφής είναι έντονα τριών διαστάσεων στις περιοχές της εισόδου, του πρώτου και του δεύτερου διαμερίσματος και της περιοχής της εξόδου, ενώ είναι μικρής σημασίας η ανάλυση στις τρεις διαστάσεις για τα υπόλοιπα τμήματα της δεξαμενής.* Συνεπώς, είναι εμφανής η ανάγκη ανάπτυξης ενός τρισδιάστατου (3-D) αριθμητικού μοντέλου για την βελτίωση της ικανότητας πρόβλεψης της ροής σε μαιανδροειδείς δεξαμενές επαφής-χλωρίωσης.

Στο κεφάλαιο 8, παρουσιάζονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της υπο-εξέτασης δεξαμενής επαφής (βάση των κατασκευαστικών σχεδίων αυτής) και αναλύεται συνοπτικά η παραγωγή του πλέγματος. Το κεφάλαιο αυτό πραγματεύεται αρχικά τη διδιάστατη ανάλυση, με σκοπό την σύγκριση των παραγόμενων αποτελεσμάτων με τα αποτελέσματα ανάλογων εργασιών που παρουσιάστηκαν στο Κεφάλαιο 7, με απώτερο στόχο την επιβεβαίωση του μαθηματικού μοντέλου. Κατόπιν το μαθηματικό μοντέλο εφαρμόζεται στις τρεις διαστάσεις καθώς όπως προαναφέρθηκε η ροή είναι έντονα τριών διαστάσεων κυρίως στα σημεία εισόδου και τα πρώτα διαμερίσματα αυτής. Τέλος, εξετάστηκε η επίδραση των διαφορετικών κινητικών μοντέλων (κινητική απενεργοποίησης μικροοργανισμών και κινητική απομείωσης του χλωρίου), στην περιγραφή της διεργασίας της απολύμανσης.

Στο κεφάλαιο 9, συνοψίζονται τα κυριότερα συμπεράσματα που προέκυψαν από την παραμετρική ανάλυση και αναλύονται οι προτάσεις για μελλοντική διερεύνηση.

Στο σχήμα που ακολουθεί δίνεται συνοπτικά η δομή της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας.



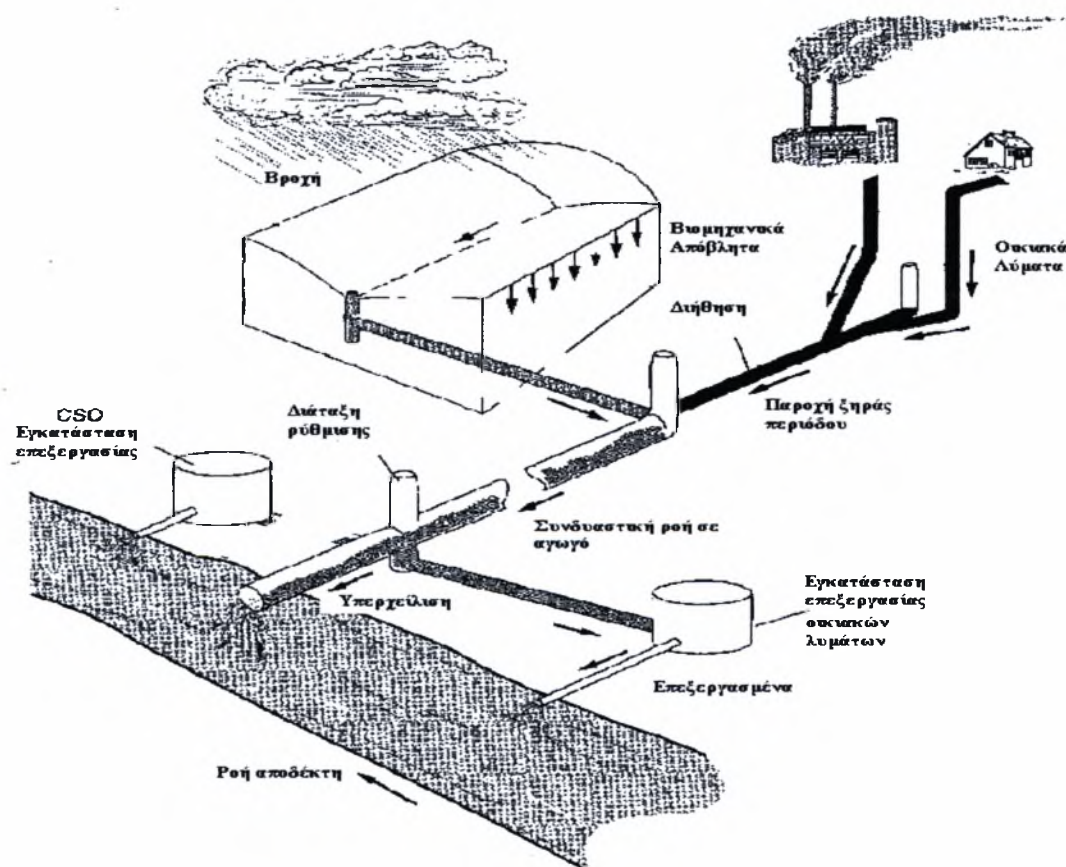
Σχήμα 1.1. : Δομή της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας

2. ΕΓΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑΣ ΑΣΤΙΚΩΝ ΛΥΜΑΤΩΝ

2.1. Στάδια στην επεξεργασία των λυμάτων

Σκοπός του κεφαλαίου αυτού είναι η εισαγωγή σε ορισμένες βασικές έννοιες που χρησιμοποιούνται στα επόμενα κεφάλαια και η εξοικείωση του αναγνώστη με τις βασικές αρχές που επικρατούν στο σχεδιασμό των εγκαταστάσεων επεξεργασίας καθώς και με τα κύρια χαρακτηριστικά των αστικών λυμάτων. Πολλά από τα παρακάτω θέματα αποτελούν αντικείμενο ξεχωριστών επιστημών και η πιο λεπτομερής ανάπτυξή τους ξεφεύγει από το σκοπό της παρουσίασης αυτής.

Κάθε κοινωνία παράγει τόσο στερεά όσο και υγρά απόβλητα καθώς επίσης και αέριους ρύπους. Τα υγρά απόβλητα αποτελούν το νερό που προέρχεται μετά από τη χρήση του σε ποικίλες εφαρμογές της κοινωνίας, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχήμα 2.1.



Σχήμα 2.1: Προέλευση υγρών αποβλήτων (Metcalf & Eddy, 2003).

Τα τελευταία χρόνια τα έργα αποχέτευσης και επεξεργασίας αστικών λυμάτων, αποτελούν μέρος της συνολικής κοινωνικής προσπάθειας για τη λήψη άμεσων και δραστικών μέτρων κατά της ραγδαία αυξανόμενης ρύπανσης του περιβάλλοντος.

Το σύνολο των έργων αποχέτευσης και επεξεργασίας αστικών λυμάτων αποτελείται από τα παρακάτω μέρη (Στάμου & Βογιατζής, 1994):

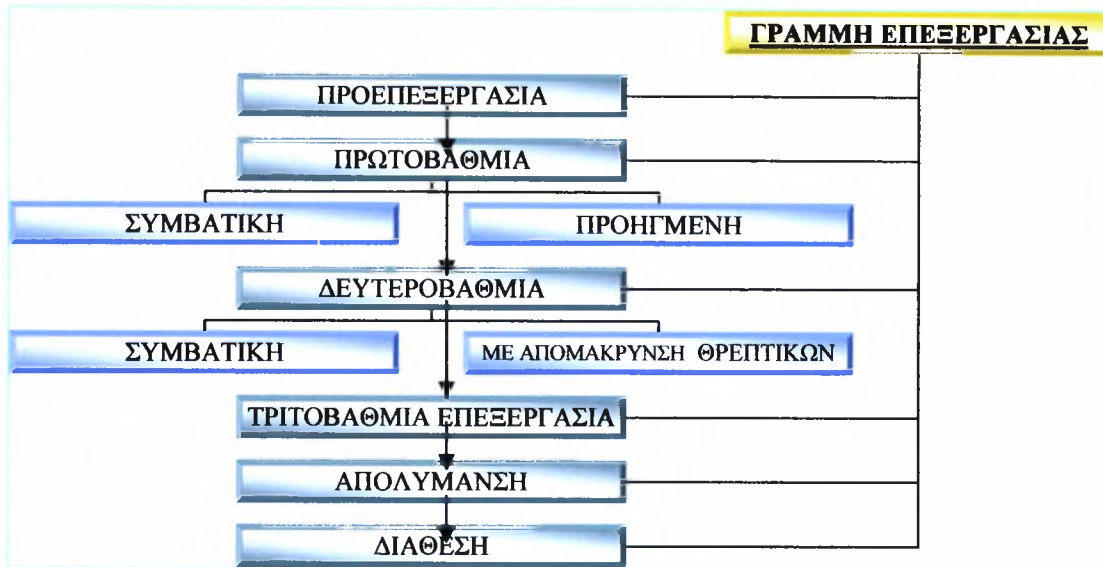
- α) Σύστημα αποχέτευσης ομβρίων και ακαθάρτων, το οποίο διακρίνεται: i) σε χωριστικό, στο οποίο υπάρχει ξεχωριστό δίκτυο αγωγών συλλογής και μεταφοράς των ακαθάρτων στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας ή στον αποδέκτη και ξεχωριστό δίκτυο συλλογής και μεταφοράς των ομβρίων, ii) σε παντορροϊκό στο οποίο υπάρχει κοινό δίκτυο ομβρίων και ακαθάρτων και iii) σε μικτό όπου μέρος της αποχετευόμενης περιοχής εξυπηρετείται με χωριστικό και μέρος με παντορροϊκό,
- β) **Εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων,**
- γ) Έργα μεταφοράς και διάθεσης των επεξεργασμένων αποβλήτων στον αποδέκτη,
- δ) Έργα αντιπλημμυρικής προστασίας κατοικημένων περιοχών από όμβρια γειτονικών λεκανών απορροής.

Η διαδικασία επεξεργασίας των αστικών λυμάτων ακολουθεί γενικά μια σειρά από διάφορα στάδια που παρουσιάζονται στο Σχήμα 2.2. Το κάθε στάδιο μπορεί να περιλαμβάνει φυσικές, χημικές και βιολογικές διεργασίες απομάκρυνσης των διαφόρων ουσιών από τα λύματα. Στις φυσικές η απομάκρυνση γίνεται με την εκμετάλλευση των φυσικών χαρακτηριστικών των λυμάτων, στις χημικές γίνεται με την προσθήκη χημικών ουσιών και στις βιολογικές με κάποια βιολογική διεργασία. Για την καλύτερη κατανόηση της σύστασης των λυμάτων, σε επόμενη ενότητα, παρουσιάζονται τα κύρια φυσικά, χημικά και βιολογικά χαρακτηριστικά αυτών.

Η προεπεξεργασία έχει ως σκοπό την προστασία κυρίως του μηχανολογικού εξοπλισμού στις επόμενες κύριες διαδικασίες επεξεργασίας. Περιλαμβάνει την απομάκρυνση των μεγάλου σχετικά μεγέθους ανόργανων στερεών των λυμάτων (πέτρες, άμμος, επιπλέουσες ύλες κ.α.) και την εξισορρόπηση της παροχής αυτών. Η απομάκρυνση των στερεών γίνεται με εσχάρωση και εξάμμωση.

Στη συνέχεια, **η πρωτοβάθμια επεξεργασία** αποσκοπεί στην απομείωση των στερεών των αποβλήτων, με απομάκρυνση των αιωρούμενων στερεών με πρωτοβάθμια καθίζηση ή / και επίπλευση (συμβατική φυσική επεξεργασία) καθώς και των κολλοειδών στερεών με χημική επεξεργασία και καθίζηση (προηγμένη πρωτοβάθμια επεξεργασία). Πολλές φορές

αποτελεί το μόνο είδος επεξεργασίας, ενώ άλλες πάλι φορές ανάλογα με την επεξεργασία που ακολουθεί μπορεί και να παραληφθεί.

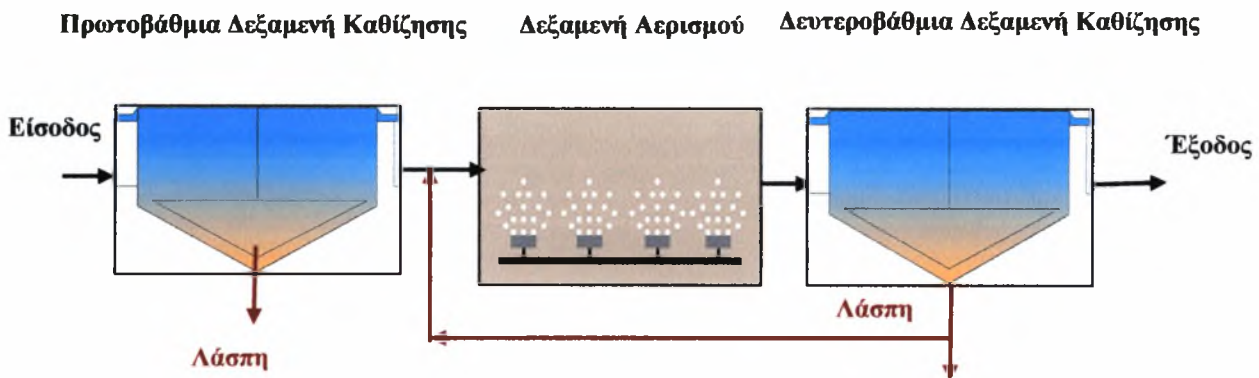


Σχήμα 2.2: Στάδια επεξεργασίας αστικών λυμάτων (Στάμου & Βογιατζής, 1994)

Η δευτεροβάθμια ή βιολογική επεξεργασία είναι η απομάκρυνση των βιοδιασπάσιμων οργανικών ουσιών των λυμάτων με βιολογικές διεργασίες στις οποίες χρησιμοποιούνται μικροοργανισμοί που καταναλώνουν τις οργανικές ουσίες. Κατόπιν ακολουθεί απομάκρυνση των μικροοργανισμών με τη βοήθεια της καθίζησης. Η βιολογική επεξεργασία διακρίνεται σε δύο κατηγορίες ανάλογα με το αν οι μικροοργανισμοί βρίσκονται σε αιώρηση μέσα στα λύματα "συστήματα ενεργού ιλύος" ή προσκολλημένοι σε κάποια επιφάνεια "βιολογικά φίλτρα / βιολογικοί δίσκοι".

Οι περισσότερες εγκαταστάσεις επεξεργασίας αστικών λυμάτων στον Ελλαδικό χώρο αλλά και σε παγκόσμιο επίπεδο, εφαρμόζουν το σύστημα της ενεργού ιλύος. Τα συστήματα ενεργού ιλύος, που χρησιμοποιούνται σήμερα κατά κόρον για τη βιολογική διαχείριση των αστικών αλλά και των βιομηχανικών αποβλήτων, χρονολογούνται από τις αρχές του 1880.

Στο πέρας των δεκαετιών αναπτύχθηκαν διαφορετικές σχεδιαστικές διαμορφώσεις των συστημάτων ενεργού ιλύος, σε σχέση με τον αρχικό τους σχεδιασμό. Επιπρόσθετα, με συνεχώς αυξημένη συχνότητα, τα συστήματα ενεργού ιλύος, που χρησιμοποιούνται σήμερα, μπορούν να συνδυάσουν παράλληλα με την απομείωση του οργανικού φορτίου και νιτροποίηση, βιολογική απομάκρυνση του αζώτου και / ή βιολογική απομάκρυνση του φωσφόρου. Οι εναλλακτικοί αυτοί σχεδιασμοί περιλαμβάνουν αντιδραστήρες σε σειρά, που λειτουργούν υπό αερόβιες, ανοξικές και αναερόβιες συνθήκες, χρησιμοποιώντας εσωτερική ανακυκλοφορία του ανάμικτου υγρού (Metcalf & Eddy, 2003).



Σχήμα 2.3 : Τυπικό διάγραμμα ροής συστήματος ενεργούς ιλύος

Ένα αντιπροσωπευτικό διάγραμμα ροής των κύριων μονάδων που απαρτίζουν ένα σύστημα ενεργού ιλύος απεικονίζεται στο Σχήμα 2.3 και συνίσταται από:

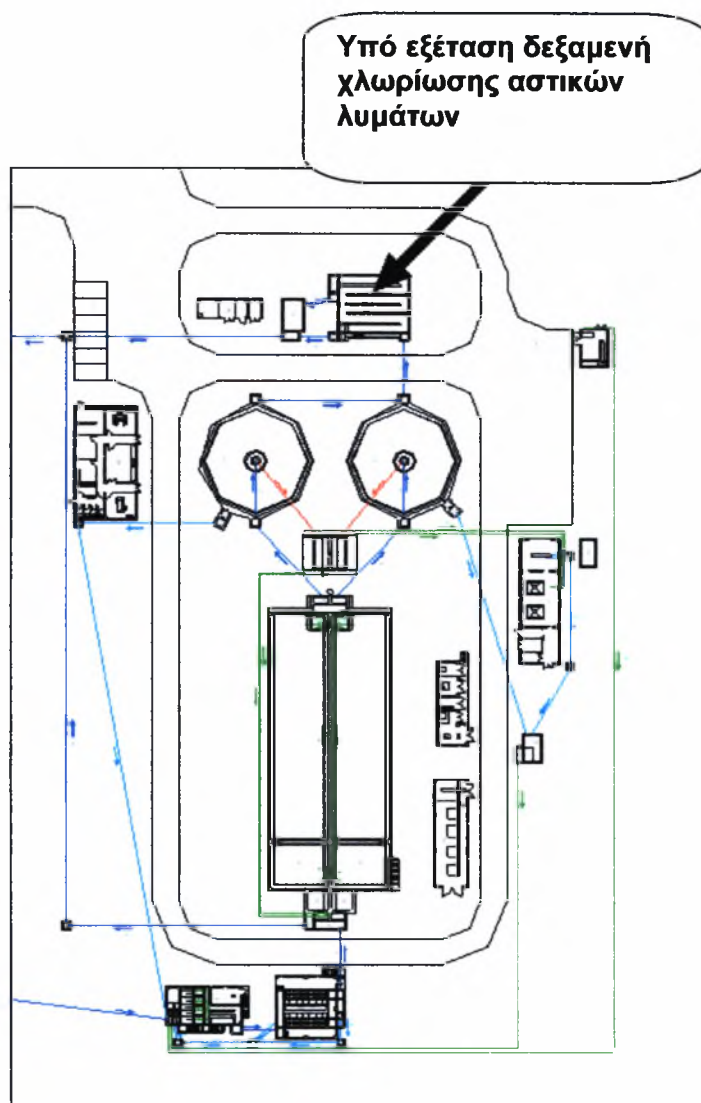
- μια δεξαμενή αερισμού στην οποία οι μικροοργανισμοί που είναι υπεύθυνοι για την επεξεργασία διατηρούνται σε αιώρηση και τροφοδοτούνται με οξυγόνο,
- μια δεξαμενή καθίζησης στην οποία λαμβάνει χώρα διαχωρισμός του υγρού από τα στερεά και
- ένα σύστημα ανακυκλοφορίας των απομακρυνόμενων στερεών πίσω στον αντιδραστήρα.

Η τριτοβάθμια επεξεργασία έχει ως σκοπό με τη σειρά της την απομάκρυνση κάποιων ρυπαντών που δεν απομακρύνονται στα προηγούμενα στάδια επεξεργασίας, όπως περαιτέρω απομάκρυνση των ολικών στερεών με διήθηση, του φωσφόρου με χημική επεξεργασία κ.ο.κ.

Το τελικό στάδιο πριν την διάθεση των επεξεργασμένων αποτελεί **η απολύμανση** η οποία αποσκοπεί στην καταστροφή των παθογόνων μικροοργανισμών των λυμάτων ώστε να αποφεύγεται η μετάδοση ασθενειών μέσω του νερού του αποδέκτη. Είναι το τελευταίο και το μοναδικό στάδιο επεξεργασίας με σκοπό την καταστροφή των παθογόνων αν και μικρή απομάκρυνση αυτών παρατηρείται και σε προηγούμενα στάδια. *Η διεργασία της απολύμανσης αποτελεί αντικείμενο της παρούσας μεταπτυχιακής, με σκοπό την κατανόηση της αρχής λειτουργίας και την βελτίωση όλων εκείνων των χαρακτηριστικών που επηρεάζουν την απόδοσή της.*

Στο Σχήμα 2.4, δίνεται μια τυπική γενική διάταξη μιας εγκατάστασης επεξεργασίας αστικών λυμάτων, στην οποία λαμβάνει χώρα τριτοβάθμια επεξεργασία και χλωρίωση των επεξεργασμένων, πριν τη διάθεσή τους στον αποδέκτη, όπου μπορεί να διακρίνει κανείς το σύνολο των μονάδων που απαρτίζουν ένα κλασικό σύστημα επεξεργασίας όπως αυτό

περιγράφηκε παραπάνω. Επιπρόσθετα η δεξαμενή χλωρίωσης της εγκατάστασης επεξεργασίας του σχήματος αποτέλεσε το αντικείμενο μελέτης της συγκεκριμένης μεταπτυχιακής εργασίας.



Σχήμα 2.4 : Γενική διάταξη εγκατάστασης επεξεργασίας αστικών λυμάτων, όπου επισημαίνεται η θέση της υπό μελέτη δεξαμενής χλωρίωσης.

2.2. Χαρακτηριστικά των ανεπεξέργαστων αστικών λυμάτων

Τα χαρακτηριστικά των αποβλήτων διακρίνονται σε φυσικά, χημικά και βιολογικά. Στην ενότητα αυτή γίνεται μια συνοπτική ανάλυση των κύριων χαρακτηριστικών των αστικών λυμάτων, ενώ στον Πίνακα 2.1 που ακολουθεί παρουσιάζεται η τυπική σύσταση των ανεπεξέργαστων αστικών λυμάτων.

Πίνακας 2.1 : Τυπική σύσταση ανεπεξέργαστων αστικών λυμάτων (Metcalf & Eddy, 2003) & (Linsley et al., 1992)

ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	ΜΟΝΑΔΑ ΜΕΤΡΗΣΗΣ	ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ *		
		Χαμηλή φόρτιση	Μέση φόρτιση	Υψηλή φόρτιση
Στερεά ολικά (TS)	mg/l	390	720	1230
Διαλυμένα ολικά στερεά (TDS)	mg/l	270	500	860
Αιωρούμενα ολικά στερεά (TSS)	mg/l	120	210	400
Καθιζάνοντα στερεά	mg/l	5	10	20
Βιοχημικά απαιτούμενο οξυγόνο, BOD ₅ , 20 °C	mg/l	110	190	350
Χημικά απαιτούμενο οξυγόνο, COD	mg/l	250	430	800
Άζωτο (Ολικό ως N)	mg/l	20	40	70
Οργανικό	mg/l	8	15	25
Ελεύθερη αμμωνία	mg/l	12	25	45
Νιτρώδη	mg/l	0	0	0
Νιτρικά	mg/l	0	0	0
Φώσφορος(Ολικός ως P)	mg/l	4	7	12
Οργανικός	mg/l	1	2	4
Ανόργανος	mg/l	3	5	10
Χλωρίδια	mg/l	30	50	90
Θειικά	mg/l	20	30	50
Λίπη και έλαια	mg/l	50	90	100
Πτητικά οργανικά (VOCs)	mg/l	<100	100-400	>400
Ολικά κολοβακτηρίδια TC	No./100 ml	10 ⁶ -10 ⁸	10 ⁷ -10 ⁹	10 ⁷ -10 ¹⁰
Κολοβακτηρίδια περιττωματικής FC	No./100 ml	10 ³ -10 ⁵	10 ⁴ -10 ⁶	10 ⁵ -10 ⁸

* Η χαμηλή φόρτιση βασίζεται σε παροχή λυμάτων περίπου 750 l/κάτοικο_d, η μέση φόρτιση σε παροχή περίπου 460 l/κάτοικο_d και η υψηλή φόρτιση σε 240 l/κάτοικο_d.

2.2.1. Φυσικά χαρακτηριστικά

Τα πιο βασικά φυσικά χαρακτηριστικά των αποβλήτων είναι: τα στερεά που περιέχουν, η θερμοκρασία, το χρώμα και η οσμή τους.

Στερεά : Τα ολικά στερεά (Total Solids, TS) βρίσκονται αιωρημένα (αιωρούμενα στερεά, Suspended Solids, SS) ή διαλυμένα στη μάζα των αποβλήτων (διαλυμένα στερεά, Dissolved Solids, DS) και αποτελούνται από οργανικά ή εξαερώσιμα στερεά (Volatile Solids, VS) και ανόργανα (αδρανή, ή σταθερά ή μη εξαερώσιμα, Non-volatile ή Fixed Solids - FS) στερεά. Από άποψη ρύπανσης του υδάτινου περιβάλλοντος μεγάλη σημασία έχουν τα SS, γιατί κατά τη διοχέτευση των λυμάτων σε έναν υδάτινο φορέα συσσωρεύονται στον πυθμένα δημιουργώντας στρώμα λάσπης και ανεπιθύμητες αναερόβιες συνθήκες για το οικοσύστημα του φορέα. Τα DS προκαλούν τη θολότητα του υδάτινου αποδέκτη (Στάμου, 1995).

Θερμοκρασία : Η θερμοκρασία των λυμάτων είναι γενικά μεγαλύτερη από εκείνη του πόσιμου νερού. Συνήθως κυμαίνεται από 10 έως 22 °C και είναι μεγαλύτερη από τη θερμοκρασία του περιβάλλοντος το μεγαλύτερο μέρος του έτους με εξαίρεση τις ζεστές μέρες του καλοκαιριού. Η θερμοκρασία των λυμάτων είναι ρυθμιστικός παράγοντας του βιολογικού και χημικού χαρακτήρα των λυμάτων. Πιο αναλυτικά αύξηση της θερμοκρασίας επιφέρει ανάπτυξη των μικροοργανισμών που ευνοούνται από τη θερμοκρασία, επιτάχυνση των βιολογικών διεργασιών και μείωση της διαλυτότητας των αερίων στη μάζα των λυμάτων, κυρίως του οξυγόνου.

Χρώμα : Το χρώμα είναι ενδεικτικό της ηλικίας προέλευσης των λυμάτων. Τα λύματα που δεν έχουν υποστεί σήψη έχουν γκρίζο χρώμα, ενώ εκείνα που έχουν υποστεί σήψη (έντονη αποσύνθεση εξαιτίας αναερόβιων διεργασιών) έχουν μαύρο χρώμα. Η μεταβολή του χρώματος οφείλεται στην κατανάλωση του διαλυμένου οξυγόνου από τους μικροοργανισμούς που διασπούν τις οργανικές ενώσεις των λυμάτων (*Linsley et al., 1992*).

Οσμή : Η οσμή των λυμάτων είναι ενδεικτικό στοιχείο της κατάστασής τους. Λύματα που δεν έχουν υποστεί σήψη έχουν ελαφρά δυσάρεστη οσμή, ενώ εκείνα που έχουν υποστεί σήψη έχουν ενοχλητική οσμή, που οφείλεται στην έκλυση υδρόθειου.

2.2.2. Χημικά χαρακτηριστικά

Τα χημικά χαρακτηριστικά των λυμάτων είναι πολύ πιο σημαντικά από τα φυσικά χαρακτηριστικά και δίνουν μια πιο αντιπροσωπευτική εικόνα του γενικού χαρακτήρα τους. Γενικά διακρίνονται σε οργανικά, ανόργανα και αέρια.

Οργανικά συστατικά : τα κυριότερα οργανικά συστατικά των λυμάτων είναι οι πρωτεΐνες που αποτελούν βασικά συστατικά των ζώντων οργανισμών, οι υδρογονάνθρακες, τα λιπίδια που αποτελούν συστατικά των τροφών του ανθρώπου, οι επιφανειακές ενεργειακές ουσίες σαν συστατικά των απορρυπαντικών, οι φαινόλες σε βιομηχανικά απόβλητα και εντομοκτόνα, τα φυτοφάρμακα κ.α., που είναι τοξικές ενώσεις επικίνδυνες για όλες τις μορφές ζωής. Από άποψη ρύπανσης του περιβάλλοντος, όταν οι οργανικές ουσίες διοχετευθούν σε ένα υδάτινο φορέα, οι μικροοργανισμοί που περιέχονται στα λύματα ή στο φορέα τις χρησιμοποιούν σαν τροφές, καταναλώνοντας παράλληλα το οξυγόνο του φορέα. Όταν ο ρυθμός κατανάλωσης του διαλυμένου οξυγόνου ξεπεράσει την ικανότητα επανοξυγόνωσης του φορέα και η συγκέντρωση του διαλυμένου οξυγόνου πέσει κάτω από μια ορισμένη τιμή, ανατρέπεται η ισορροπία του οικοσυστήματος του φορέα.

Η μέτρηση των οργανικών συστατικών των λυμάτων είναι πρακτικά αδύνατη λόγω της πολυπλοκότητας της σύστασής τους. Έτσι, σαν μέτρο των οργανικών αλλά και γενικότερα του ρυπαντικού φορτίου των λυμάτων χρησιμοποιείται η ποσότητα του οξυγόνου που απαιτείται για να οξειδώσει πλήρως τα οργανικά συστατικά. Η απαιτούμενη ποσότητα οξυγόνου εκφράζεται συνήθως: α) με το βιοχημικά απαιτούμενο οξυγόνο –Biochemical Oxygen Demand BOD, που ορίζεται ως η ποσότητα του οξυγόνου που απαιτείται για την οξείδωση των οργανικών συστατικών των λυμάτων από τους μικροοργανισμούς σε αερόβιες συνθήκες και β) με το χημικά απαιτούμενο οξυγόνο – Chemical Oxygen Demand COD, που ορίζεται ως η ποσότητα του οξυγόνου που απαιτείται για την πλήρη χημική οξείδωση των οργανικών συστατικών των λυμάτων σε CO_2 και H_2O , από ισχυρό οξειδωτικό μέσο (π.χ. διχρωμικό κάλιο) και σε όξινες συνθήκες.

Ανόργανα συστατικά : Το άζωτο N είναι ένα από τα βασικά συστατικά των ζώντων οργανισμών και περιέχεται στα αστικά λύματα ως οργανικό N (πρωτεΐνες, ουρία και αμινοξέα), και ως αμμωνιακό N (άλατα NH_4^+ ή NH_3). Σαν προϊόν της οξείδωσης των προαναφερόμενων μορφών το N μπορεί να υπάρχει σαν NO_3^- και NO_2^- .

Ο φώσφορος P αποτελεί επίσης βασικό συστατικό των ζώντων οργανισμών και περιέχεται στα αστικά λύματα σαν ανόργανος P , ως ορθοφωσφορικά και λιγότερο ως πολυφωσφορικά και ως οργανικός P , σε μικρότερες όμως ποσότητες από τον ανόργανο.

Το pH των λυμάτων είναι ιδιαίτερα σημαντικό, διότι από αυτό εξαρτάται ένα πλήθος φυσικοχημικών και βιολογικών διεργασιών που γίνονται στο υδάτινο περιβάλλον.

Η αλκαλικότητα, οφείλεται στην παρουσία ιόντων HCO_3^- , CO_3^{2-} ή OH^- που βρίσκονται ενωμένα με Ca , Mg , Na , K ή NH_4^+ . Η παρουσία των παραπάνω ιόντων στα αστικά λύματα οφείλεται στο πόσιμο νερό καθώς και στις εισροές στο αποχετευτικό σύστημα. Η αλκαλικότητα ρυθμίζει το pH των λυμάτων.

Η παρουσία *χλωριούχων* στα λύματα μειώνει τη διαλυτότητα του οξυγόνου και επηρεάζει τον προσδιορισμό του COD.

Το θείο ως βασικό συστατικό των ζώντων οργανισμών βρίσκεται στα λύματα σε διάφορες μορφές. Η σημαντικότερη από τις ενώσεις του θείου είναι το SO_4^- καθώς η παρουσία του στα λύματα δημιουργεί προβλήματα που οφείλονται στο σχηματισμό H_2S και H_2SO_4 . Η παρουσία του υδρόθειου είναι δυσάρεστη λόγω της πρόκλησης οσμών στο αποχετευτικό δίκτυο και στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας. Το κύριο πρόβλημα από την παρουσία του θειικού οξέος είναι η διάβρωση των αγωγών.

Αέρια : τα βασικά αέρια που περιέχονται στα λύματα είναι τα N_2 , O_2 , CO_2 , H_2S , NH_3 και CH_4 .

2.2.3. Παθογόνοι μικροοργανισμοί

Οι παθογόνοι μικροοργανισμοί περιέχονται στα αστικά λύματα ως προϊόντα αποβολών ασθενών ή φορέων ασθενειών και μπορούν να μεταφέρουν και να προκαλέσουν ασθένειες μέσω του νερού στον άνθρωπο, όπως χολέρα δυσεντερία, τυφοειδή πυρετό, ηπατίτιδα κ.α. (Στάμου, 1995)

Η απολύμανση αναφέρεται στην μερική καταστροφή των παθογόνων οργανισμών. Στην επεξεργασία των αποβλήτων διακρίνονται τέσσερις κατηγορίες ανθρώπινων εντερικών οργανισμών οι οποίες θεωρούνται κρίσιμες για την πρόκληση ασθενειών, τα βακτήρια, τα πρωτόζωα, τα ωοκύτταρα και οι κυστίδες, οι παρασιτικοί σκώληκες και οι ιοί. Στον Πίνακα 2.2, παρουσιάζονται οι συγκεντρώσεις των μικροοργανισμών που συναντώνται στα ανεπεξέργαστα λύματα και η αντίστοιχη μολυσματική δόση (Metcalf & Eddy, 2003).

Οι παθογόνοι μικροοργανισμοί βρίσκονται στους υδάτινους φορείς σε μικρές συγκεντρώσεις και σε μεγάλη ποικιλία ειδών, γεγονός που καθιστά αδύνατη την ανίχνευση και τον ποσοτικό προσδιορισμό του κάθε είδους. Έτσι, αντί για προσδιορισμό κάθε είδους παθογόνων μικροοργανισμών γίνεται προσδιορισμός ενδεικτικών μικροοργανισμών, που η παρουσία τους στο νερό υποδηλώνει παρουσία παθογόνων μικροοργανισμών.

Ως ενδεικτικοί παθογόνοι μικροοργανισμοί χρησιμοποιούνται τα κολοβακτηρίδια, που βρίσκονται σε μεγάλους αριθμούς στα έντερα του ανθρώπου ($100 - 400 \cdot 10^9/\text{κατ. d}$) και των θερμόαιμων ζώων. Τα δύο βασικά είδη κολοβακτηριδίων είναι τα *Escherichia Coli* (E-Coli) και τα *Enterobacter Aerogenes*. Τα E-Coli περιέχονται στα περιττώματα και η παρουσία τους στο νερό δείχνει ανεπιφύλακτα ότι υπάρχει μόλυνση από περιττώματα. Τα *Enterobacter Aerogenes* αν και υπάρχουν στα περιττώματα, ζουν συνήθως στο έδαφος και στο νερό και έτσι η παρουσία τους δεν αποτελεί σαφή ένδειξη περιττωματικής μόλυνσης.

Ο προσδιορισμός των E-Coli είναι εξαιρετικά δύσκολος γιατί είναι δύσκολος ο διαχωρισμός τους από τα κολοβακτηρίδια που ζουν στο έδαφος. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό της παθογένειας των νερών κυρίως το σύνολο των κολοβακτηριδίων (Total Coliforms, TC), τα κολοβακτηρίδια περιττωματικής προέλευσης (Fecal Coliforms, FC) ή και άλλοι δείκτες. Ο προσδιορισμός του πλήθους των FC και TC γίνεται με τις τεχνικές των πολλαπλών διαλύσεων και του φίλτρου μεμβράνης (Στάμου, 1995)

Πίνακας 2.2: Συγκεντρώσεις παθογόνων μικροοργανισμών στα ανεπεξέργαστα λύματα (Metcalf & Eddy, 2003)

Οργανισμοί	Συγκέντρωση MPN/100 ml *	Μολυσματική δόση, Αριθμός μικροοργανισμών
<u>Βακτήρια</u>		
Βακτηροειδή	10^7 - 10^{10}	
Κολοβακτηρίδια, Ολικά	10^7 - 10^9	
Κολοβακτηρίδια περιττωματικής προελεύσεως	10^6 - 10^8	10^6 - 10^{10}
<i>Clostridium perfringens</i>	10^3 - 10^5	1 - 10^{10}
Εντερόκοκκοι	10^4 - 10^5	
Στρεπτόκοκκοι περιττωματικής προελεύσεως	10^4 - 10^7	
<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	10^3 - 10^6	
Shigella	10^0 - 10^3	10-20
Σαλμονέλα	10^2 - 10^4	10^1 - 10^8
<u>Πρωτόζωα</u>		
Cryptosporidium parvum oocysts	10^1 - 10^3	1-10
Entamoeba histolytica cysts	10^1 - 10^1	10-20
Giardia lamblia cysts	10^3 - 10^4	<20
<u>Παρασιτικοί σκώληκες</u>		
Ova	10^1 - 10^3	
Ascaris lumbricoides	10^2 - 10^0	1-10
<u>Ιοί</u>		
Εντερικοί ιοί	10^3 - 10^4	1-10
Κολοβακτηριοφάγοι	10^3 - 10^4	

* **Σημείωση:** Οι συγκεντρώσεις των κολοβακτηρίων συνήθως αναφέρονται ως “ο πιο πιθανός αριθμός ανά 100 ml” (most probable number per 100 ml – MPN/100ml). Ο MPN βασίζεται στην εφαρμογή της κατανομής Poisson για ακραίες τιμές στην ανάλυση του αριθμού των θετικών και αρνητικών δειγμάτων που προκύπτουν όταν εξετάζονται πολλαπλά μερίδια σε ίσους όγκους και σε μερίδια που συνθέτουν μια γεωμετρική σειρά. Επισημαίνεται ότι ο MPN δεν αναφέρεται στην απόλυτη συγκέντρωση των οργανισμών που παρουσιάζονται, αλλά στην στατιστική εκτίμηση της συγκέντρωσης αυτής (Metcalf & Eddy, 2003)

2.3. Θεσμικό πλαίσιο – Η κατάσταση στον Ελλαδικό χώρο

Η νομοθεσία που διέπει την επεξεργασία αστικών υγρών αποβλήτων αποτελείται από ένα πλέγμα Οδηγιών δηλ. νομοθετικών πράξεων των αρμόδιων Οργάνων της Ε.Ε. (Συμβούλιο Υπουργών και Ευρωπαϊκό Κοινοβούλιο), που ενσωματώθηκαν στο Ελληνικό δίκαιο στα πλαίσια της υποχρέωσης της χώρας μας να εναρμονίσει την νομοθεσία της με την κοινοτική νομοθεσία (Αγγελάκης, 2004).

Η οδηγία 91/271/EEC που αφορά στην επεξεργασία των αστικών υγρών αποβλήτων αποτελεί το κύριο και βασικό νομοθέτημα, που διέπει τον τομέα επεξεργασίας αστικών

υγρών αποβλήτων και συγκεκριμένα ορίζει την ελάχιστη αναγκαία τεχνική υποδομή σε δίκτυα αποχετεύσεως και σε εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων, που πρέπει να διαθέτουν οι οικισμοί της ΕΕ ανάλογα με τον πληθυσμό και τον αποδέκτη των επεξεργασμένων. Επίσης, καθορίζει τα ανώτατα επιτρεπτά όρια των ποιοτικών χαρακτηριστικών των επεξεργασμένων λυμάτων, ενώ προβλέπει συγκεκριμένα χρονικά όρια μέσα στα οποία οι οικισμοί κάθε χώρας μέλους οφείλουν να ολοκληρώσουν την απαιτούμενη υποδομή συλλογής, επεξεργασίας και διάθεσης των αστικών λυμάτων τους. Με την αριθμ.5673/400/14.3.97 Κοινή Υπουργική Απόφαση με τίτλο ‘‘ Μέτρα και Όροι για την Επεξεργασία των Αστικών Λυμάτων ’’ η Ελλάδα έχει ενσωματώσει την οδηγία στο εθνικό δίκαιο.

Η Οδηγία ορίζει πως τα κράτη μέλη μεριμνούν ώστε τα αστικά λύματα που διοχετεύονται σε αποχετευτικά δίκτυα να υποβάλλονται, πριν την απόρριψή τους, σε δευτεροβάθμια ή σε ισοδύναμη επεξεργασία ως εξής:

- το αργότερο έως τις 31/12/2000, για όλες τις απορρίψεις λυμάτων από οικισμούς με ι.π. άνω των 15.000
- το αργότερο έως τις 31/12/2005, για όλες τις απορρίψεις λυμάτων από οικισμούς με ι.π. 10.000 – 15.000
- το αργότερο έως τις 31/12/2005, για λύματα που αποβάλλονται σε γλυκά ύδατα και σε εκβολές ποταμών, από οικισμούς με ι.π. 2.000 – 10.000

Συνεπώς, για όλα τα αστικά συγκροτήματα με πληθυσμό άνω των 2.000 κατοίκων απαιτείται να διαθέτουν σύστημα συλλογής και δευτεροβάθμιας βιολογικής επεξεργασίας των λυμάτων τους. Περαιτέρω επεξεργασία απαιτείται μόνο όταν ο αποδέκτης των επεξεργασμένων υγρών αποβλήτων χαρακτηρίζεται ευαίσθητος (αναπτύσσονται ή υπάρχει κίνδυνος να αναπτυχθούν συνθήκες ευτροφισμού) (*Κοινοτική Οδηγία 91/271/EEC, 1991*).

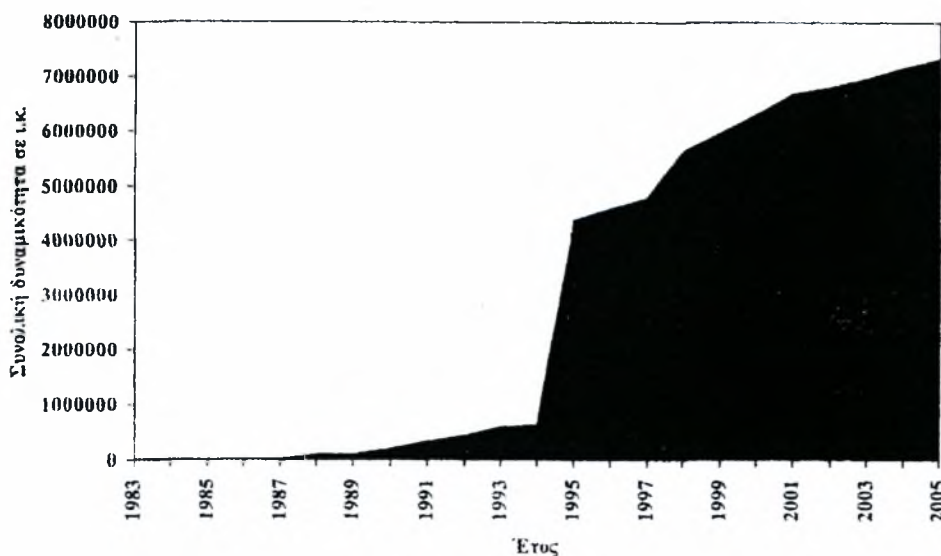
Η ανάγκη απολύμανσης των λυμάτων για την περαιτέρω μείωση των παθογόνων μικροοργανισμών (όπως αναφέρεται σε επόμενη παράγραφο τα συστήματα ενεργού ιλύος επιτυγχάνουν απομάκρυνση των παθογόνων μικροοργανισμών της τάξης του 90 έως 99 %, με αποτέλεσμα η συγκέντρωση των περιττωματικών κολοβακτηριδίων στα δευτεροβάθμια επεξεργασμένα λύματα να κυμαίνεται 10^5 έως 10^6 FC/100 ml), πρέπει να εξετάζεται ανά περίπτωση ανάλογα με τα έργα διάθεσης των εκροών και τα χαρακτηριστικά του υδάτινου αποδέκτη. Έτσι, για παράδειγμα σε περίπτωση διάθεσης των υγρών λυμάτων στην ανοικτή θάλασσα, η απολύμανση είναι συχνά περιττή καθώς εξαιτίας της αραιώσης και της φυσικής

φθοράς των μικροοργανισμών, οι συγκεντρώσεις τους είναι χαμηλές ώστε να μην δημιουργούν κινδύνους μετάδοσης ασθενειών. Ωστόσο, η απολύμανση των λυμάτων θεωρείται απαραίτητη στις περιπτώσεις διάθεσης των υγρών αποβλήτων σε κλειστά υδάτινα σώματα καθώς και στην περίπτωσης επαναχρησιμοποίησής τους (Ανδρεαδάκης *et al.*, 2005).

Σύμφωνα με τους Κανονισμούς Ποιότητας Υδατικών Αποδεκτών (ΚΠΥΑ) της Ε.Ε. (76/160/ΕΟΚ), τα ανώτατα επιτρεπόμενα όρια περιττωματικών κολοβακτηριδίων για ύδατα κολύμβησης ανέρχονται σε 2000 FC/100 ml για το 95 % των δειγμάτων. Εξετάζοντας τη δυσμενέστερη περίπτωση, όπου οι εκροές δεν υπόκεινται σε καμιά σημαντική αραίωση πριν τη διάθεσή τους στον υδατικό αποδέκτη οι ΚΠΥΑ μπορούν να αποτελέσουν κριτήρια εκροής των εγκαταστάσεων επεξεργασίας.

Στην προσπάθεια θέσπισης μικροβιολογικών κριτηρίων επαναχρησιμοποίησης λυμάτων στην Ελλάδα, για περιορισμένη και απεριόριστη χρήση το Εργαστήριο Υγειονομικής Τεχνολογίας του ΕΜΠ, διαμόρφωσε ποιοτικά κριτήρια που συνοψίζονται στα παρακάτω: α) για την περιορισμένη χρήση 200 FC/100 ml στο 50 % των δειγμάτων και β) για την απεριόριστη χρήση, 5 FC/100 ml στο 80 % των δειγμάτων (Αγγελάκης, 2004).

Ο πληθυσμός της Ελλάδας υπολογίζεται σήμερα σε 10,9 εκ. κατοίκους. Όπως προαναφέρεται, σύμφωνα με οδηγία 91/271/EEC θα έπρεπε μέχρι το τέλος του 2005 να εξυπηρετείται με μονάδες δευτεροβάθμιας επεξεργασίας λυμάτων το σύνολο σχεδόν των οικισμών (με εξαίρεση τους οικισμούς ≤ 2.000 ι.κ., που διαθέτουν τα απόβλητά τους σε μη ευαίσθητους αποδέκτες).



Σχήμα 2.5: Διαχρονική αύξηση της συνολικής δυναμικότητας των εγκαταστάσεων επεξεργασίας αστικών λυμάτων στον Ελλαδικό χώρο (Αγγελάκης, 2004)

Σήμερα, περισσότερες από 300 μονάδες επεξεργασίας αστικών λυμάτων λειτουργούν σε επίπεδο χώρας και εξυπηρετούν περισσότερο από το 60 % του πληθυσμού της χώρας. Για τον υπόλοιπο πληθυσμό εκτιμάται ότι απαιτούνται 2000 ΕΕΛ (>500 ι.κ.), που θα εξυπηρετούν το 20 % και 3000 ΕΕΛ (<500 ι.κ.), που θα εξυπηρετούν το υπόλοιπο 14 % του συνολικού πληθυσμού της χώρας. Η εξελικτική ανάπτυξη των έργων επεξεργασίας λυμάτων στην Ελλάδα φαίνεται στο Σχήμα 2.5, όπου καταδεικνύεται ότι αρκετά μεγάλα έργα στην Ελλάδα, σχεδιάστηκαν και κατασκευάστηκαν την περασμένη δεκαετία.

3. ΘΕΩΡΙΑ ΤΗΣ ΑΠΟΛΥΜΑΝΣΗΣ

Ο στόχος της απολύμανσης των υγρών αποβλήτων είναι η καταστροφή των παθογόνων μικροοργανισμών σε αποδεκτά επίπεδα, ώστε η διάθεση των υγρών αποβλήτων στους υδάτινους αποδέκτες να μην δημιουργεί κινδύνους στη δημόσια υγεία και στο περιβάλλον (Αγγελάκης, 2004).

3.1. Μέθοδοι και μέσα απολύμανσης

Η απολύμανση συνήθως επιτυγχάνεται με την χρήση χημικών παραγόντων, φυσικών παραγόντων, μηχανικών μέσων και της ακτινοβολίας.

Χημικοί Παράγοντες : Οι χημικοί παράγοντες που έχουν χρησιμοποιηθεί ως απολυμαντικά περιλαμβάνουν το χλώριο και τα παράγωγα αυτού, το βρώμιο, το ιώδιο, το όζον, τις φαινόλες και τα φαινολικά παράγωγα, τις αλκοόλες, τα βαρέα μέταλλα και άλλα συναφή συστατικά, τις βαφικές ύλες, τα σαπούνια και τα συνθετικά απορρυπαντικά, τις τετραμερείς αμμωνιακές ενώσεις, το υπεροξείδιο του υδρογόνου, διάφορα αλκάλια και διάφορα οξέα. Από αυτά τα πλέον συνηθισμένα απολυμαντικά είναι οι οξειδωτικοί παράγοντες και το χλώριο.

Φυσικοί παράγοντες : Τα φυσικά απολυμαντικά που δύναται να χρησιμοποιηθούν είναι η θερμότητα, το φως και τα ηχητικά κύματα. Για παράδειγμα η θέρμανση του νερού μέχρι το σημείο ζέσεώς του, επιτυγχάνει την καταστροφή των κύριων παθογόνων μη σπορογόνων βακτηριδίων. Η θέρμανση χρησιμοποιείται κυρίως στις γαλακτοβιομηχανίες και δεν εφαρμόζεται στην απολύμανση των μεγάλων ποσοτήτων αστικών λυμάτων λόγω του απαγορευτικού κόστους εφαρμογής της. Το ηλιακό φως αποτελεί επίσης ένα καλό απολυμαντικό, πρωτίστως εξαιτίας του κλάσματος της υπεριώδους ακτινοβολίας στο ηλεκτρομαγνητικό φάσμα. Η έντονη αποσύνθεση των μικροοργανισμών που παρατηρείται στις δεξαμενές οξείδωσης, οφείλεται σε ένα βαθμό στην υπεριώδη ακτινοβολία του ηλιακού φωτός. Για τον ίδιο λόγο έχουν αναπτυχθεί ειδικοί λαμπτήρες που εκπέμπουν υπεριώδους ακτίνες και έχουν χρησιμοποιηθεί με μεγάλη επιτυχία στην απολύμανση του νερού και των αστικών λυμάτων (Metcalf & Eddy, 2003). Πρόκειται για λαμπτήρες χαμηλής πίεσης ατμών υδραργύρου που εκπέμπουν περισσότερο από το 85 % της ακτινοβολίας σε μήκος κύματος $\lambda = 253,7 \text{ nm}$. Η εφαρμογή της μεθόδου είναι προβληματική σε ακάθαρτα υγρά, διότι η

ακτινοβολία απορροφάται εύκολα από τα αιωρούμενα στερεά και από τα διαλυμένα οργανικά μόρια, μειώνοντας έτσι κατά πολύ την απολυμαντική της ικανότητα (Μαρκαντωνάτος, 1990).

Μηχανικά μέσα: Τα βακτήρια και οι διάφοροι μικροοργανισμοί απομακρύνονται σε ορισμένο ποσοστό μηχανικά μαζί με τα αιωρούμενα κυρίως υλικά, που αφαιρούνται στις διάφορες επιμέρους μονάδες μιας εγκατάστασης επεξεργασίας λυμάτων. Ενδεικτικά, ποσοστά απομάκρυνσης δίνονται στον πίνακα που ακολουθεί.

Πίνακας 3.1 : Απομάκρυνση ή καταστροφή των βακτηρίων με διάφορες διαδικασίες επεξεργασίας

Διεργασία	Ποσοστό απομάκρυνσης
Χονδροεσχарισμός	0-5
Λεπτοεσχарισμός	10-20
Αμμοσυλλέκτες	10-25
Απλή καθίζηση	25-75
Χημική καθίζηση	40-80
Σταλακτικά φίλτρα	90-95
Ενεργός ιλύς	90-98
Χλωρίωση επεξεργασμένων λυμάτων	98-99,999

Ακτινοβολία : Οι κύριες μορφές ακτινοβολίας είναι η ηλεκτρομαγνητική, η ακουστική και η σωματιδιακή. Παρόλο που σε εργαστηριακή κλίμακα γίνεται χρήση συσκευών με δέσμες ηλεκτρονίων υψηλής ενέργειας για την απολύμανση του νερού και των λυμάτων, ωστόσο δεν έχουν αναπτυχθεί εμπορικά αντίστοιχες διατάξεις.

3.2. Χαρακτηριστικά του ιδανικού απολυμαντικού

Τα χαρακτηριστικά του ιδανικού απολυμαντικού είναι: (α) υψηλός ρυθμός εξουδετέρωσης παθογόνων μικροοργανισμών, (β) χαμηλή δραστηριότητα με ουσίες που περιέχονται στο νερό και χαμηλή παραγωγή επικίνδυνων παραπροϊόντων, (γ) χαμηλό κόστος λειτουργίας και μικρές απαιτήσεις συντήρησης, (δ) μηδενικός κίνδυνος κατά τη χρήση του, (ε) εύκολη ανιχνευσιμότητα στο νερό και (στ) χαμηλή τοξικότητα στους υδρόβιους οργανισμούς. Οι ιδιότητες που συνοψίζονται παραπάνω δεν είναι συγκεντρωμένες σε ένα απολυμαντικό, ωστόσο θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κατά την αξιολόγηση των εναλλακτικών μεθόδων (Αγγελάκης, 2004).

Στον Πίνακα 3.2 γίνεται σύγκριση το πλέον χρησιμοποιούμενων απολυμαντικών μέσων, όσον αφορά τα παραπάνω χαρακτηριστικά του ιδανικού απολυμαντικού μέσου.

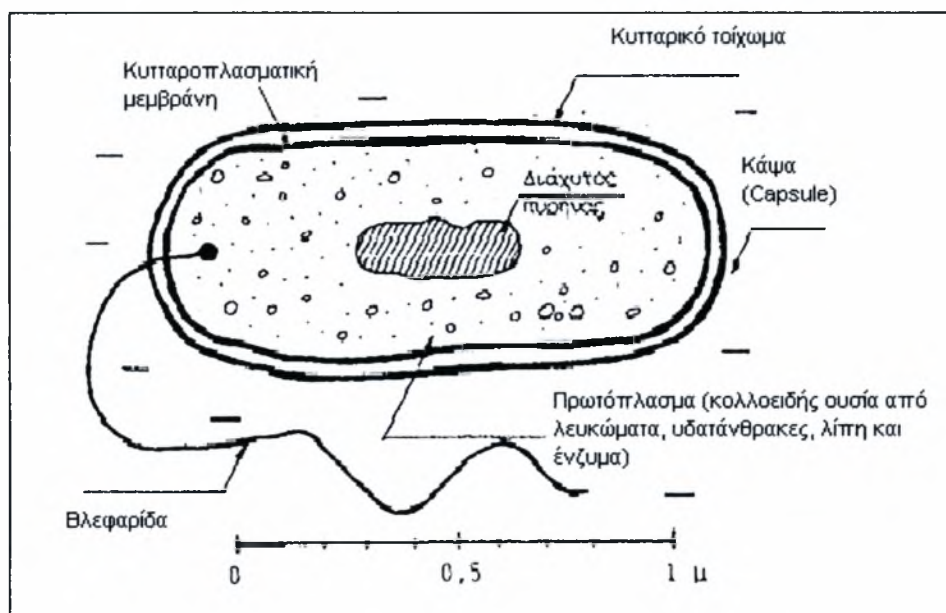
Πίνακας 3.2 : Σύγκριση ιδανικών και πραγματικών χαρακτηριστικών των πιο συχνά χρησιμοποιούμενων απολύμαντικών (Metcalf & Eddy, 2003)

Χαρακτηριστικά	Χλώριο	Υποχλωριώδες Νάτριο	Υποχλωριώδες Ασβέστιο	Διοξειδίο του χλωρίου	Όζον	UV ακτινοβολία
Διαθεσιμότητα / κόστος	Χαμηλό	Μέτρια χαμηλό	Μέτρια χαμηλό	Μέτρια χαμηλό	Μέτρια χαμηλό	Μέτρια υψηλό
Αποσμητική ικανότητα	Υψηλή	Υψηλή	Μέση	Μέση	Υψηλή	-----
Ομοιογένεια	Ομοιογενές	Ομοιογενές	Ομοιογενές	Ομοιογενές	Ομοιογενές	Ομοιογενές
Αλληλεπίδραση με εξωγενή υλικά	Οξειδωση οργανικού υλικού	Ενεργό οξειδωτικό	Ενεργό οξειδωτικό	Ενεργό οξειδωτικό	Οξειδωση οργανικού υλικού	-----
Διαβρωτικότητα	Υψηλή	Διαβρωτικό	Διαβρωτικό	Διαβρωτικό	Υψηλή	-----
Τοξικότητα στους ανώτερους οργανισμούς	Υψηλή	Τοξικό	Τοξικό	Τοξικό	Τοξικό	Τοξικό
Διεσδυτικότητα	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Μέτρια
Μέρμνα Ασφάλειας	Υψηλή	Μέτρια	Μέτρια	Μέτρια	Μέτρια	Χαμηλή
Διαλυτότητα	Μέτρια	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	-----
Σταθερότητα	Σταθερό	Ελαφρώς ασταθές	Σχετικά σταθερό	Σχετικά σταθερό	Ασταθές	-----
Τοξικότητα στους μ/ο	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή
Τοξικότητα σε T _{περ}	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή	Υψηλή

3.3. Μηχανισμοί απολύμανσης

Η μικροβιοκτόνος δράση των μέσων απολύμανσης εξηγείται με διάφορους μηχανισμούς βλαπτικής επιδράσεως στο κύτταρο (Σχήμα. 3.1) που συνοψίζονται στα ακόλουθα (Μαρκαντωνάτος, 1990) & (Metcalf & Eddy, 2003) :

- Φθορά ή καταστροφή του κυτταρικού τοιχώματος, που οδηγεί στη διάλυση και το θάνατο του μικροοργανισμού. Ορισμένοι παράγοντες, όπως η πενικιλίνη, εμποδίζουν τη σύνθεση του κυτταρικού τοιχώματος.



Σχήμα 3.1: Σχηματική οργάνωση μικροβιακού κυττάρου (Μαρκαντωνάτος, 1990)

- Αλλαγή της εκλεκτικής διαπερατότητας της κυτταροπλάσματικής μεμβράνης με αποτέλεσμα τη διαφυγή ζωτικών θρεπτικών συστατικών, όπως είναι το άζωτο και ο φώσφορος. Τέτοια επίδραση έχουν οι φαινολικές ουσίες και τα απορρυπαντικά.
- Αλλαγή της κολλοειδούς φύσεως του πρωτοπλάσματος, όπως π.χ. πήξη των πρωτεϊνών με τη θέρμανση ή μεταβολή της φυσικής τους συστάσεως με τα οξέα και τις βάσεις, με τελικό αποτέλεσμα το θάνατο.
- Παρεμπόδιση της ενζυματικής δραστηριότητας και της ικανότητας του κυττάρου να συνθέσει νέο υλικό. Τα οξειδωτικά μέσα όπως το χλώριο, μεταβάλλουν τη

χημική σύνθεση των ενζύμων και τα αδρανοποιούν, με αποτέλεσμα να παρεμποδίζεται ο κανονικός ρυθμός μεταβολισμού και επιβίωσης. Τα ένζυμα, που είναι τόσο ζωτικά για το μεταβολισμό, βρίσκονται σε πολύ μικρές ποσότητες κι έτσι εξηγείται η σημαντική μικροβιοκτόνος δράση του χλωρίου ακόμη και σε πολύ μικρή συγκέντρωση (0,5-1 mg/l) (Μαρκαντωνάτος, 1990).

- Τροποποίηση του DNA ή του RNA του μικροοργανισμού. Όταν τα φωτόνια της UV ακτινοβολίας απορροφούνται από το DNA των βακτηρίων και των πρωτόζωων καθώς και από το RNA και DNA των ιών, σχηματίζονται ισοσθενή διμερή. Ο σχηματισμός διπλών δεσμών διαταράσσει την επαναληπτική διεργασία με αποτέλεσμα οι μικροοργανισμοί να αδυνατούν να αναπαραχθούν και έτσι απενεργοποιούνται (Metcalf & Eddy, 2003).

3.4. Παράγοντες που επηρεάζουν τη διεργασία της απολύμανσης

Κατά τη μελέτη της κινητικής της απολυμαντικής δράσεως θεωρείται ότι ισχύουν οι ακόλουθες ιδεατές συνθήκες (Μαρκαντωνάτος, 1990):

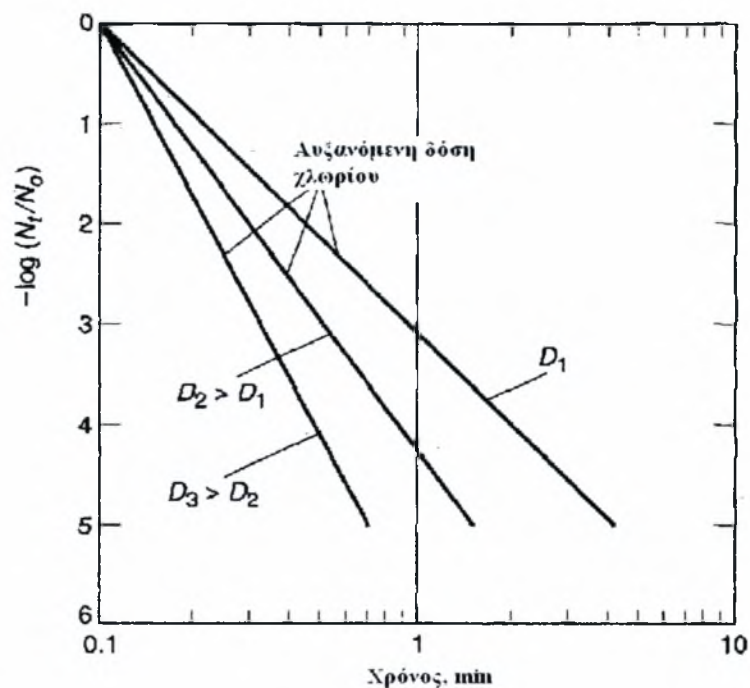
- Όλα τα κύτταρα κάθε γένους μικροβίων είναι εξίσου ευαίσθητα στον παράγοντα απολυμάνσεως που χρησιμοποιείται.
- Τα κύτταρα και η απολυμαντική ουσία είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο υγρό.
- Η συγκέντρωση του παράγοντα απολυμάνσεως παραμένει πρακτικά σταθερή στη διάρκεια επαφής.
- Το νερό δεν περιέχει ουσίες, που παρεμβάλλονται στην απολυμαντική δράση, μηχανικά (κάλυψη) ή με άλλο τρόπο.

Υπό τις συνθήκες αυτές ο ρυθμός της απολυμαντικής δράσεως εξαρτάται από (α) το χρόνο επαφής, (β) τη συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου (γ) την ένταση και το είδος του φυσικού μέσου απολυμάνσεως, (δ) τη συγκέντρωση και το είδος των μικροβίων, (ε) τη θερμοκρασία και (ε) τη φύση του υγρού.

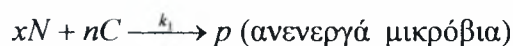
3.4.1. Χρόνος επαφής

Ο χρόνος επαφής είναι από τους βασικότερους παράγοντες της απολύμανσης. Συγκεκριμένα δουλεύοντας στην Αγγλία στις αρχές του 1900, ο Harriet Chick παρατήρησε ότι όσο αυξάνεται το χρονικό διάστημα της επαφής, για μια συγκεκριμένη σταθερή συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου, τόσο αυξάνει το ποσοστό καταστροφής των μικροβίων (Σχήμα 3.2).

Σχήμα 3.2: Επίδραση του χρόνου επαφής και της συγκέντρωσης στην επιβίωση των *E.Coli*, σε ένα αντιδραστήρα διαλείποντος έργου, με χρήση χλωρίου ως απολυμαντικό μέσο, στους 20°C (Metcalf & Eddy, 2003)



Η παρατήρηση αυτή παρουσιάστηκε στην βιβλιογραφία το 1908 (Chick, 1908). Πιο αναλυτικά, ο Chick μελέτησε τους ρυθμούς απολύμανσης βακτηρίων που εκτίθονταν σε μια σταθερή συγκέντρωση απολυμαντικού χρησιμοποιώντας αυλωτούς αντιδραστήρες και απαρίθμησε την επιβίωση αυτών σε τακτά χρονικά διαστήματα. Η αντίδραση μεταξύ του πρωτοπλάσματος των βακτηρίων και του χημικού απολυμαντικού θεωρήθηκε από τον Chick ανάλογη μιας στοιχειακής βιο-μοριακής χημικής αντίδρασης :



Η αντίδραση αυτή περιγράφεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{dN_t}{dt} = -k_1 N^x C^n \text{ (ανενεργά μικρόβια)}^p$$

όπου x και $n = 1$. Υποθέτοντας ότι το απολυμαντικό βρίσκεται σε περίσσεια και ότι η αντίδραση είναι αναντιστρεπτή προέκυψε ο νόμος του Chick ο οποίος σε διαφορική μορφή δίνεται από την σχέση:

$$\frac{dN_t}{dt} = -kN_t \quad (3.1)$$

όπου :

dN_t/dt = ο ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσης των μικροοργανισμών με το χρόνο

k = σταθερά ρυθμού αδρανοποίησης (ψευδο-πρώτης τάξης $k = k_1 C$)

N_t = ο αριθμός των μικροοργανισμών σε χρόνο t

t = χρόνος

Εάν N_0 είναι ο αριθμός των μικροοργανισμών την χρονική στιγμή $t = 0$ η παραπάνω σχέση μπορεί να ολοκληρωθεί στην ακόλουθη μορφή:

$$\frac{N_t}{N_0} = e^{-k \cdot t} \text{ ή ισοδύναμα } \ln \frac{N_t}{N_0} = -k \cdot t \quad (3.2)$$

Η σταθερά του ρυθμού αδρανοποίησης k της προηγούμενης εξίσωσης, μπορεί να προσδιορισθεί από την γραφική παράσταση του $-\ln(N_t/N_0)$ ως προς τον χρόνο επαφής t . Ο νόμος του Chick δηλώνει απλά ότι ο ρυθμός καταστροφής των μ/ο είναι ανάλογος της συγκέντρωσης των μ/ο που απομένει μετά από χρόνο t , για μια δεδομένη συγκέντρωση απολυμαντικού (*Gyurek and Gordon, 1998*).

3.4.2. Συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου

Επιπρόσθετα, δουλεύοντας στην Αγγλία στις αρχές του 1900 ο Herbert Watson ανέφερε ότι η σταθερά του ρυθμού αδρανοποίησης σχετιζόταν με τη συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου, σύμφωνα με την σχέση:

$$k = k' \cdot C^n \quad (3.3)$$

όπου:

k = σταθερά ρυθμού αδρανοποίησης

k' = σταθερά αποδεκατισμού (die-off)

C = συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου

n = σταθερά αραίωσης

Συνδυάζοντας τις εκφράσεις που προτάθηκαν από τους Chick και Watson σε διαφορική μορφή, καταλήγουμε στη σχέση (Hass and Kara, 1984):

$$\frac{dN_t}{dt} = -k' \cdot C^n \cdot N_t \quad (3.4)$$

Ολοκληρώνοντας την προηγούμενη σχέση προκύπτει:

$$\frac{N_t}{N_o} = e^{-k' \cdot C^n \cdot t} \text{ ή ισοδύναμα } \ln \frac{N_t}{N_o} = -k' \cdot C^n \cdot t \quad (3.5)$$

Η γραμμικοποιημένη μορφή της εξίσωσης είναι:

$$\ln C = -\frac{1}{n} \cdot \ln t + \frac{1}{n} \cdot \ln \left[\frac{1}{k'} \left(-\ln \frac{N_t}{N_o} \right) \right] \quad (3.6)$$

Οι τιμές του n μπορούν να προκύψουν από τη γραφική παράσταση του C ως προς το χρόνο σε διπλή λογαριθμική κλίμακα (log-log), για ένα δεδομένο βαθμό αδρανοποίησης.

Αν $n = 1$, η συγκέντρωση (δόση) του απολυμαντικού είναι εξίσου σημαντική με το χρόνο επαφής με το απολυμαντικό μέσο

Αν $n > 1$, η συγκέντρωση είναι πιο σημαντική από το χρόνο

Αν $n < 1$, ο χρόνος είναι πιο σημαντικός από την συγκέντρωση

Ο Πίνακας 3.3 δείχνει τις τιμές που μπορεί να πάρει ο συντελεστής αποδεκατισμού k' για διάφορα απολυμαντικά σε σχέση με ορισμένα είδη μικροοργανισμών, όπως είναι τα βακτήρια, οι ιοί και οι κύστες, για 99 % καταστροφή σε τιμή $pH = 7$ και σε $20^\circ C$. Με βάση τα δεδομένα αυτά διαπιστώνεται ότι το πιο αποτελεσματικό απολυμαντικό είναι το O_3 ,

ακολουθεί το HOCl, το ClO₂, το OCl⁻ και οι χλωραμίνες. Αυτή η γενίκευση παρατηρείται σε όλους σχεδόν τους τύπους των μικροοργανισμών. Επίσης, πρέπει να επισημανθεί ότι από τα δεδομένα του πίνακα 3.3 προκύπτει ότι τα εντερικά βακτήρια θανατώνονται πιο εύκολα, από ότι οι ιοί, ενώ οι κύστες είναι πολύ ανθεκτικές.

Πίνακας 3.3 : Τιμές ενδεικτικού συντελεστή αποδεκατισμού (θνησιμότητας) για διάφορα απολυμαντικά σε σχέση με ορισμένα είδη μικροοργανισμών (Μήτρακας, 1996)

Απολυμαντικό	Βακτήρια E.Coli	Ιός Poliovirus I	Κύστες Entamoeba histolytica
O ₃	2300	920	3.1
HOCl	120	4.6	0.23
ClO ₂	16	2.4	
OCl ⁻	5	0.44	
NHCl ₂	0.84	0.00092	
NH ₂ Cl	0.12	0.014	

Η σχέση 3.9 μπορεί να γραφεί ισοδύναμα με την ακόλουθη απλή μορφή, αν θεωρηθεί ένα συγκεκριμένο ποσοστό απενεργοποίησης (Finch et al., 1993):

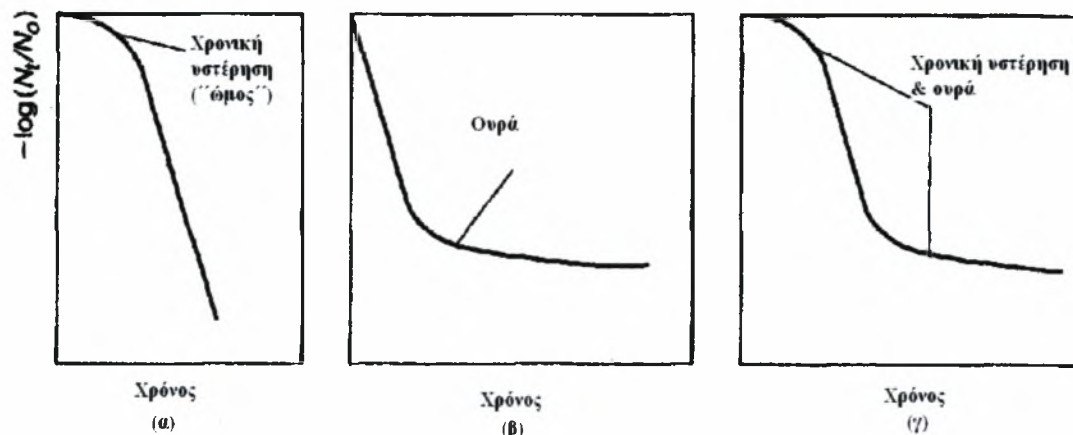
$$C \cdot T = K \quad (3.7)$$

όπου:

K = μια συγκεκριμένη σταθερά (για κάθε είδος μικροοργανισμού), για την επίτευξη ενός συγκεκριμένου ποσοστού απενεργοποίησης, σε μια δεδομένη θερμοκρασία. Για ορισμένα απολυμαντικά μέσα, η τιμή του pH είναι επίσης σημαντική στον προσδιορισμό της σταθεράς K. Επιπρόσθετα, η σταθερά K εμπεριέχει την σταθερά του ρυθμού αδρανοποίησης k.

Η προηγούμενη εξίσωση δηλώνει πως οποιοδήποτε συνδυασμός των C, T που δίνει ένα γινόμενο K, έχει επιτύχει τον επιθυμητό βαθμό αδρανοποίησης.

Οι αποκλίσεις από τον κανόνα των Chick και Watson είναι συνηθισμένες. Στο Σχήμα 3.3α φαίνεται ότι μπορεί να υπάρξει μια χρονική υστέρηση (καμπύλη – ‘shoulder’) στην οποία τα αιωρούμενα συστατικά στο υγρό αντιδρούν αρχικώς με το απολυμαντικό καθιστώντας το απολυμαντικό μέσο ως αναποτελεσματικό. Στο Σχήμα 3.3β παρουσιάζεται το φαινόμενο της ‘ουράς – tailing’ ως αποτέλεσμα της προστασίας των μικροοργανισμών που πρόκειται να απολυμανθούν από τα μεγάλα σωματίδια. Στο Σχήμα 3.3γ φαίνεται η συνδυασμένη επίδραση της χρονικής υστέρησης και του φαινομένου της ‘ουράς’.



Σχήμα 3.3 : Αποκλίσεις από την αρχική έκφραση του νόμου του Chick. (α) φαινόμενο χρονικής υστέρησης όπου τα αιωρούμενα συστατικά του υγρού αντιδρούν αρχικά με το χλώριο (β) φαινόμενο της ουράς όπου τα μεγάλα σωματίδια εμποδίζουν (προστατεύουν) την χλωρίωση των μικροοργανισμών (γ) συνδυασμός των προαναφερόμενων (Metcalf & Eddy, 2003).

Η εξίσωση 3.5 όταν εφαρμόζεται στα αστικά λύματα, αδυνατεί να αιτιολογήσει τα ευμετάβλητα και ετερογενή χαρακτηριστικά των λυμάτων. Αν τεθεί $n = 1$ και θεωρηθεί ότι η συγκέντρωση C αντιστοιχεί στο υπολειπόμενο χλώριο C_R , η σχέση εφαρμόζεται από πολλές υπηρεσίες για τον έλεγχο της διεργασίας απολύμανσης.

3.4.3. Ένταση και φύση του φυσικού παράγοντα απολύμανσης

Όπως αναφέρθηκε η θερμότητα και το φως είναι φυσικά απολυμαντικά που έχουν χρησιμοποιηθεί στην απολύμανση των αστικών λυμάτων. Έχει αποδειχθεί πως η αποτελεσματικότητά τους είναι συνάρτηση της έντασής τους. Για παράδειγμα, αν θεωρήσουμε ότι ο ρυθμός αποσύνθεσης των μικροοργανισμών περιγράφεται από μια αντίδραση πρώτης τάξης, τότε η επίδραση της εντάσεως του φυσικού απολυμαντικού μέσου αντικατοπτρίζεται στην σταθερά k μέσω περίπλοκων σχέσεων.

3.4.4. Συγκέντρωση και είδος των μικροοργανισμών

Η αποτελεσματικότητα των διαφόρων απολυμαντικών μέσων μπορεί να επηρεαστεί από τον τύπο, τη φύση και τις συνθήκες των μικροοργανισμών. Γενικά, δεν έχουν παρατηρηθεί σημαντικές διαφορές στο βαθμό καταστροφής των μ/ο μεταξύ υψηλών και χαμηλών τιμών συγκεντρώσεώς τους. Ωστόσο, όταν παρατηρείται τέτοια απόκλιση (στις μεγάλες κυρίως διαφορές συγκεντρώσεων), μπορεί να εκφραστεί από την εμπειρική σχέση (Μαρκαντωνάτος, 1990):

$$C' \cdot N_c = K \quad (3.8)$$

όπου:

C = συγκέντρωση του μέσου απολυμάνσεως

N_c = συγκέντρωση των μ/ο που ελαττώνεται κατά ορισμένο ποσοστό σε χρόνο t

r = σταθερά που σχετίζεται με τη συγκέντρωση του μέσου απολυμάνσεως

K = σταθερά

Σε αντίθεση με τη συγκέντρωση, η αποτελεσματικότητα του απολυμαντικού μέσου επηρεάζεται σημαντικά από τη μορφή και το είδος των μ/ο. Έτσι, π.χ. οι συνηθισμένοι τύποι μικροβίων καταστρέφονται πιο εύκολα σε σχέση με τα σπόρια, που παρουσιάζουν ιδιαίτερη ανθεκτικότητα στα χημικά απολυμαντικά και καταστρέφονται μόνο με υψηλή θερμοκρασία. Επιπλέον, τα διάφορα είδη μ/ο παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές στην ανθεκτικότητα έναντι ορισμένου απολυμαντικού μέσου. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι για τον ίδιο χρόνο επαφής και το ίδιο pH, απαιτούνται κατά προσέγγιση οι ακόλουθες ποσότητες υπολειμματικού χλωρίου για καταστροφή των διαφόρων μ/ο κατά 99,6 έως 100 %, σε $0 - 5^{\circ}\text{C}$:

E-Coli : 0,025 mg/l Cl_2

Ιός πολυεμελίτιδας : 0,12 mg/l Cl_2

Ιστολυτική αμοιβάδα (κύστη) : 18 mg/l Cl_2

Ανθρακας (βάκιλλος) : 20 mg/l Cl_2

3.4.5. Θερμοκρασία

Η επίδραση της θερμοκρασίας στον ρυθμό καταστροφής των μ/ο με τη χρήση χημικών απολυμαντικών, μπορεί να παρουσιαστεί με τη μορφή εξίσωσης van't Hoff-Arrhenius. Η αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί γενικώς σε πιο γρήγορο αποδεκατισμό (ρυθμό καταστροφής). Η σχέση σε μορφή χρονικού διαστήματος t , που απαιτείται για να επιτευχθεί ένας συγκεκριμένος βαθμός (ποσοστό) καταστροφής είναι :

$$\ln \frac{t_1}{t_2} = \frac{E(T_2 - T_1)}{RT_1 T_2} \quad (3.9)$$

όπου:

t_1, t_2 = οι χρόνοι για επίτευξη ενός δεδομένου βαθμού καταστροφής σε θερμοκρασίες T_1 και T_2 σε $^{\circ}\text{K}$, αντίστοιχα

E = ενέργεια ενεργοποίησης, J/mole (cal/mole)

R = σταθερά των τέλειων αερίων 8,314 J/mole·K (= 1,99 cal/mole·K)

Στην περίπτωση που δεν έχουμε άμεση επίδραση της θερμοκρασίας στην εξουδετέρωση των μ/ο, δηλαδή η διακύμανση δεν είναι ακραία, η εξάρτηση της σταθεράς k (σταθερά ρυθμού αδρανοποίησης) του νόμου του Chick από τη θερμοκρασία δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$k_T = k_{20} \cdot \beta^{(T-20)} \quad (3.10)$$

όπου, β είναι μια εμπειρική σταθερά (Λέκκας, 1996).

3.4.6. Φύση του υγρού

Οι μικροοργανισμοί (μ/ο) συνυπάρχουν πάντα με κάποια ποσότητα οργανικής ύλης. Καταρχήν η οργανική ύλη είναι απαραίτητη για τους ετερότροφους μ/ο για την ανάπτυξή τους. Από την άλλη πλευρά, η κυτταρική ύλη των αποσυντιθέμενων μ/ο δημιουργεί μια συγκέντρωση οργανικών στο νερό (Λέκκας, 1996). Τα περισσότερα οργανικά υλικά αντιδρούν με τα οξειδωτικά απολυμαντικά μειώνοντας έτσι τη δραστηρότητά αυτών. Επιπλέον, η παρουσία αιωρούμενων ουσιών στο προς επεξεργασία υγρό, μειώνει την δράση του απολυμαντικού μέσου, εξαιτίας της προσρόφησης του απολυμαντικού και της θωράκισης του εγκλωβισμένου βακτηρίου (Metcalf & Eddy, 2003).

4. ΧΗΜΕΙΑ ΧΛΩΡΙΩΣΗΣ ΑΣΤΙΚΩΝ ΛΥΜΑΤΩΝ

Η χρησιμοποίηση ενώσεων του χλωρίου για απολύμανση αστικών λυμάτων, είναι παγκοσμίως διαδεδομένη, καθώς το χλώριο και οι ενώσεις του ικανοποιούν τις περισσότερες απαιτήσεις του Πίνακα 3.2. Στη συνέχεια θα γίνει μια συνοπτική αναφορά στις πλέον διαδεδομένες μορφές του χλωρίου, στη χημεία της χλωρίωσης και στο μηχανισμό της μικροβιοκτόνου δράσεως του χλωρίου.

4.1 Μορφές χλωρίου

Οι κυριότερες μορφές του χλωρίου, που χρησιμοποιούνται στην επεξεργασία των λυμάτων, είναι το αέριο χλώριο (Cl_2), το υποχλωριώδες νάτριο (NaOCl), το υποχλωριώδες ασβέστιο [$\text{Ca}(\text{OCl})_2$] και πολύ πιο σπάνια το διοξείδιο του χλωρίου (ClO_2). Η χρήση των ενώσεων του χλωρίου περιοριζόταν μέχρι πρότινος στις σχετικά μικρές ή μεσαίου μεγέθους εγκαταστάσεις. Τα τελευταία χρόνια έγινε μια στροφή των μεγάλων εγκαταστάσεων επεξεργασίας αστικών λυμάτων προς τις ενώσεις του χλωρίου (κυρίως χρήση του υποχλωριώδους νατρίου) έναντι του αερίου χλωρίου για λόγους ασφάλειας.

Αέριο Χλώριο: Είναι κιτρινοπράσινο και είναι περίπου 2,48 φορές βαρύτερο από τον αέρα. Είναι μέτρια διαλυτό στο νερό ($8,3 \text{ Kg/m}^3$ στους $15,6^\circ\text{C}$). Η προμήθειά του γίνεται σαν υγροποιημένο αέριο υπό υψηλή πίεση. Σε χαμηλές θερμοκρασίες ($<10^\circ\text{C}$), ενώνεται με μόρια νερού σχηματίζοντας ένυδρο χλώριο, γνωστό ως “χλωριοπάγο” που φράσσει τις σωληνώσεις διανομής (AWWA, 1973).

Παρουσία υγρασίας είναι εξαιρετικά διαβρωτικό και αντιδρά σχεδόν άμεσα με όλα τα μέταλλα, όπως ο σίδηρος και ο χαλκός, ενώ δεν αντιδρά με το PVC, CPVC και ABS. Γενικά χαρακτηρίζεται ως ερεθιστικό για το αναπνευστικό σύστημα και γίνεται αντιληπτό από τους ανθρώπους σε συγκεντρώσεις στον αέρα άνω των $0,3 \text{ ppm}$ (AWWA, 1996).

Υποχλωριώδες Νάτριο: Σχηματίζεται από την αντίδραση του χλωρίου με το καυστικό νάτριο. Είναι διαθέσιμο μόνο σε υγρή μορφή σε περιεκτικότητα συνήθως 12,5 έως 17 % σε χλώριο. Το διάλυμα παρουσιάζει έντονη αποσύνθεση (μείωση της οξειδωτικής του ικανότητας) κυρίως σε υψηλές συγκεντρώσεις. Η σταθερότητα του διαλύματος υποχλωριώδους νατρίου επηρεάζεται από την αρχική συγκέντρωση του διαλύματος που

αποθηκεύεται, από τη θερμοκρασία αποθήκευσης, το χρονικό διάστημα της αποθήκευσης, τις πιθανές προσμίξεις (ακαθαρσίες) που εμπεριέχονται στο τελικό προϊόν και από την έκθεσή του στο ηλιακό φως. Το πρόβλημα αυτό της αποσταθεροποίησης των διαλυμάτων υποχλωριώδους νατρίου πρέπει να λαμβάνεται σοβαρά υπόψη κατά τον υπολογισμό της απαιτούμενης δοσολογίας ώστε να διαστασιολογείται ανάλογα ο όγκος αποθήκευσης (AWWA, 1996).

Πρέπει γενικά να φυλάσσεται σε δροσερούς και σκιερούς χώρους και για σχετικά μικρό χρονικό διάστημα, διότι έχει παρατηρηθεί ότι το πρόβλημα της αποσύνθεσης γίνεται έντονο μετά από ένα ή δύο μήνες αποθήκευσης. Στην περίπτωση που απαιτούνται μεγάλοι χρόνοι αποθήκευσης, το πρόβλημα αντιμετωπίζεται με χρήση αραιού διαλύματος (<15%) (Στάμου & Βογιατζής, 1994).

Έχει διαπιστωθεί πως η αποσύνθεση ξεκινά από τη φάση της παραγωγής. Το βασικό προϊόν της αποσύνθεσης αυτής, τόσο κατά την παραγωγή αλλά κύρια κατά την αποθήκευση των διαλυμάτων υποχλωριώδους νατρίου, είναι τα χλωρικά άλατα. Ο βαθμός σχηματισμού των χλωρικών αλάτων εξαρτάται από τους παράγοντες που επηρεάζουν τη σταθερότητα του διαλύματος. Τοξικολογικές έρευνες που έχουν διεξαχθεί τελευταία κατέδειξαν πως η παρουσία χλωρικών αλάτων στο πόσιμο νερό έχει σημαντική αρνητική επίπτωση στο αίμα των ανθρώπων και συνεπώς αναμένεται να οριστούν κάποια ανώτατα επιτρεπτά όρια για την παρουσία χλωρικών αλάτων στο τελικό νερό, γεγονός που ίσως να επηρεάσει την ελεύθερη χρήση διαλυμάτων υποχλωριώδους νατρίου για την απολύμανση πόσιμου νερού στο μέλλον.

Στους χώρους αποθήκευσης διαλυμάτων υποχλωριώδους νατρίου έχει διαπιστωθεί επίσης διαφυγή αερίου, το οποίο θεωρείται ως χλώριο λόγω της χαρακτηριστικής του οσμής. Ωστόσο, πιο πρόσφατες έρευνες κατέδειξαν πως πρόκειται για μονοξείδιο του χλωρίου. Οποιοδήποτε όμως και αν είναι το απαέριο, παρουσία υγρασίας προκαλεί σημαντική διάβρωση των μεταλλικών επιφανειών (AWWA, 1996).

Υποχλωριώδες Ασβέστιο : Είναι διαθέσιμο εμπορικά σε ξηρή ή υγρή μορφή. Σε ξηρή μορφή είναι διαθέσιμο ως λευκή σκόνη ή σε κόκκους και ταμπλέτες. Είναι άμεσα διαλυτό στο νερό και η διαλυτότητά του κυμαίνεται από 21,5 gr/100 ml στους 0 °C έως 23,4 gr/100 ml στους 40 °C (Metcalf & Eddy, 2003). Όπως και το υποχλωριώδες νάτριο, έτσι και το υποχλωριώδες ασβέστιο χάνει την οξειδωτική του ικανότητα με το χρόνο. Ένα άλλο βασικό χαρακτηριστικό του είναι η αντίδρασή του με τη σκληρότητα του νερού σχηματίζοντας ίζημα (λάσπη), που

δημιουργεί προβλήματα στη διεργασία της χλωρίωσης (έμφραξη του εξοπλισμού, πρόσθετη απαίτηση για συλλογή και απομάκρυνση της λάσπης).

Τόσο το NaOCl όσο και το Ca(OCl)_2 είναι αλκαλικά με αποτέλεσμα να αυξάνουν το pH των λυμάτων σε αντίθεση με το αέριο Cl_2 που το μειώνει. Το υποχλωριώδες νάτριο είναι το πιο εύχρηστο και πιο ασφαλές από τις υπόλοιπες μορφές (Στάμου & Βογιατζής, 1994).

Ο Sawyer το 1957 ανέφερε πως τα υποχλωριώδη διαλύματα εμφανίζουν σημαντικά καλύτερη απόδοση στη χλωρίωση των αστικών λυμάτων σε σχέση με το αέριο χλώριο. Θεώρησε πως σε περιβάλλον διαλύματος χαμηλού pH (περίπτωση προσθήκης αερίου χλωρίου) λαμβάνουν χώρα ανεπιθύμητες παράπλευρες αντιδράσεις που καταναλώνουν σημαντική μικροβιοκτόνο δράση. Συγκεκριμένα, οι παράπλευρες αυτές αντιδράσεις σχηματίζουν οργανοχλωραμίνες που δεν εμφανίζουν απολυμαντική δράση. Το κεντρικό συμπέρασμα από την εργασία του Sawyer ήταν πως για οποιοδήποτε απόβλητο απαιτείται προσθήκη μεγαλύτερης ποσότητας διαλύματος αερίου χλωρίου απ' ότι αν χρησιμοποιούνταν υποχλωριώδες νάτριο. Η παρατήρηση αυτή θέτει ένα σοβαρό οικονομικό προβληματισμό όταν πρόκειται να χρησιμοποιηθεί αέριο χλώριο για την απολύμανση αποβλήτων με φτωχά χαρακτηριστικά (White, 1999).

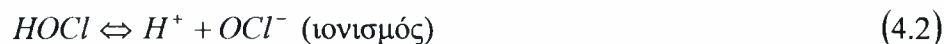
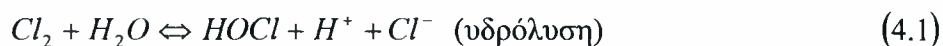
Η επιλογή σε κάθε περίπτωση της μορφής του χλωρίου που θα χρησιμοποιηθεί, εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τον απαιτούμενο εξοπλισμό, τα μέτρα ασφάλειας και το κόστος λειτουργίας. Τα υποχλωριώδη διαλύματα προτιμώνται γενικά για χρήση σε μικρής κλίμακας εγκαταστάσεις απολύμανσης και σε περιπτώσεις που το κυρίαρχο μέλημα είναι η ασφάλεια (AWWA, 1973).

4.2. Χημεία της χλωρίωσης

Οι παράγοντες που επηρεάζουν τη διεργασία της χλωρίωσης αναφέρθηκαν εκτενώς στην παράγραφο 3.4. Συμπληρωματικά αξίζει να αναφερθεί ότι επηρεάζει σημαντικά το ρυθμό και την απόδοση της απολύμανσεως, τόσο το pH (στο όξινο περιβάλλον επικρατεί η δραστικότερη ένωση του χλωρίου) όσο και η μορφή (ελεύθερο χλώριο ή ενωμένο χλώριο - χλωραμίνες), παράγοντες που αναλύονται στη συνέχεια (Μαρκαντωνάτος, 1990).

4.2.1. Ελεύθερο χλώριο

Όταν το χλώριο προστεθεί στο νερό λαμβάνουν χώρα οι ακόλουθες αντιδράσεις:



Η αντίδραση της υδρόλυσης λαμβάνει χώρα σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα (σε θερμοκρασία 18 °C απαιτούνται μόλις λίγα δέκατα του δευτερολέπτου, ενώ στους 0 °C λίγα δευτερόλεπτα). Το υποχλωριώδες οξύ που σχηματίζεται από την αντίδραση υδρόλυσης είναι ένα 'ασθενές' οξύ και διασπάται προς H^+ και OCl^- (υποχλωριώδες ανιόν). Η φορά της δεύτερης αντίδρασης εξαρτάται κυρίως από το pH αλλά και τη θερμοκρασία.

Ο βαθμός της αντίδρασης ιονισμού υπολογίζεται από την ακόλουθη σχέση:

$$K_i = \frac{(H^+)(OCl^-)}{(HOCl)} \quad (4.3)$$

Η σταθερά ιονισμού K_i εξαρτάται από τη θερμοκρασία σύμφωνα με τη σχέση του Morril :

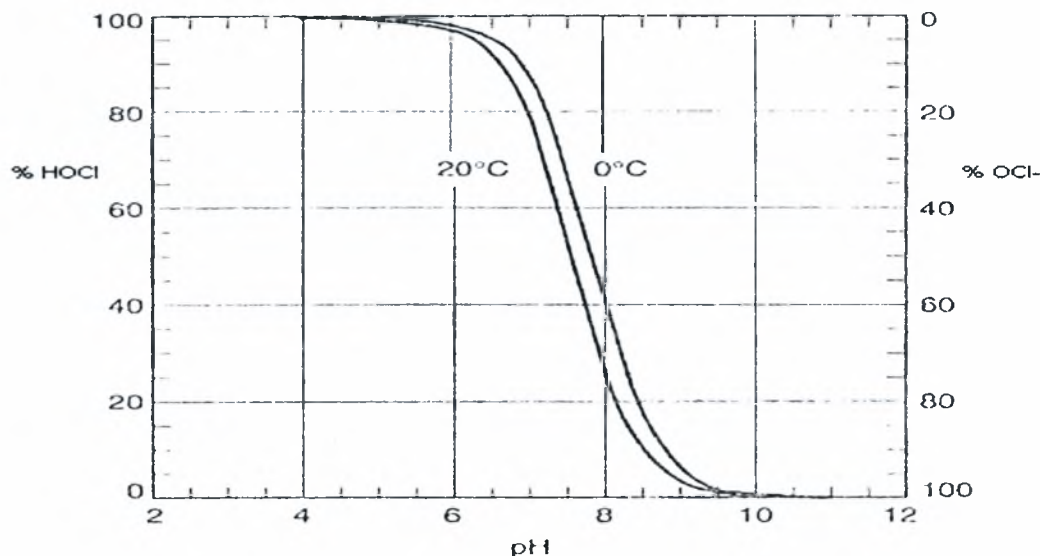
$$pKa = \frac{300}{T} - 10.0686 + 0.0253 \cdot T \quad (4.4)$$

όπου T η θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin.

Σε νερά όπου το pH κυμαίνεται μεταξύ 6,5 και 8,5 η αντίδραση ιονισμού δεν ολοκληρώνεται και εμφανίζονται και οι δύο μορφές ($HOCl$ & OCl^-) σε κάποιο βαθμό. Για υψηλές τιμές pH, η φορά της αντίδρασης ιονισμού είναι προς τα δεξιά με αποτέλεσμα την αύξηση της συγκέντρωσης του OCl^- και την μείωση της συγκέντρωσης του $HOCl$ (Σχήμα 4.1) (White, 1999) & (Λέκκας, 1996).

Το ποσοστό του υποχλωριώδους ιόντος και του υποχλωριώδους οξέος μπορεί επίσης να υπολογιστεί για διάφορες τιμές του pH από την ακόλουθη σχέση (π.χ. για 18 °C & pH = 8 προκύπτει ότι το ποσοστό του $HOCl$ είναι 27,5 %) :

$$\frac{(HOCl)}{(HOCl) + (OCl^-)} = \frac{1}{1 + \frac{(OCl^-)}{(HOCl)}} = \frac{1}{1 + \frac{K_i}{[H^+]}} \quad (4.5)$$



Σχήμα 4.1: Κατανομή ποσοστού υποχλωριώδους οξέος και ιόντων OCl^- στο νερό, ως συνάρτηση του pH, στους 0 και 20 °C (AWWA, 1996)

Η συγκέντρωση των θετικών και αρνητικών ιόντων στο διάλυμα επηρεάζει επίσης τον ιονισμό του $HOCl$. Έτσι για ένα νερό με σταθερό pH αλλά υψηλότερης ιονικής δύναμης (υψηλότερη συγκέντρωση ιόντων), η συγκέντρωση του $HOCl$ οξέος μειώνεται σημαντικά (White, 1999). Η εξάρτηση από το pH που περιγράφηκε παραπάνω έχει μεγάλη σημασία για τη διεργασία της χλωρίωσης, καθώς το $HOCl$ (υποχλωριώδες οξύ) είναι πολύ πιο δραστικό από το ιόν OCl^- (40-80 φορές περισσότερο για τα E – Coli) (Στάμου & Βογιατζής, 1994).

Το πρακτικό συμπέρασμα από τα προηγούμενα είναι ότι για χαμηλές τιμές του pH επικρατεί η δραστικότερη μορφή του χλωρίου, ενώ στην αλκαλική περιοχή απαιτείται αύξηση της προστιθέμενης ποσότητας (Μαρκαντωνάτος, 1990).

Η πολύ μεγαλύτερη δράση του ηλεκτρικά ουδετέρου $HOCl$ αποδίδεται στην ευκολία προσεγγίσεως στους μ/ο, που έχουν συνήθως προσκολλημένα αρνητικά ηλεκτρικά φορτία και στη διείσδυση στο εσωτερικό του κυττάρου όπου προσβάλλει τα ένζυμα και εμποδίζει τον κανονικό ρυθμό μεταβολισμού.

Η συνολική ποσότητα $HOCl$ και OCl^- στο νερό ονομάζεται “ελεύθερο διαθέσιμο χλώριο”.

Το ελεύθερο διαθέσιμο χλώριο μπορεί επίσης να προστεθεί στο νερό με την μορφή υποχλωριωδών αλάτων. Τόσο το υποχλωριώδες νάτριο όσο και το υποχλωριώδες ασβέστιο

υδρολύονται στο νερό για να σχηματίσουν υποχλωριώδες οξύ, σύμφωνα με τις ακόλουθες αντιδράσεις (AWWA, 1996):



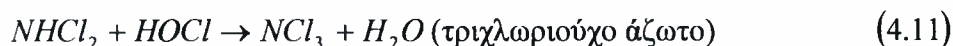
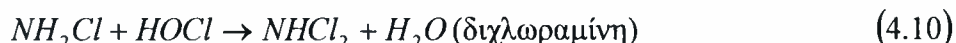
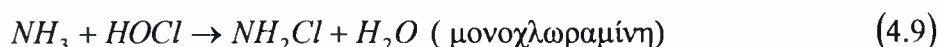
Η αντίδραση ιονισμού και για τις δύο περιπτώσεις είναι:



4.2.2. Ενωμένο χλώριο

Όπως αναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 2, τα ανεπεξέργαστα απόβλητα περιέχουν ανόργανο άζωτο κυρίως με τη μορφή αμμωνίας (επίσης ως νιτρώδη και νιτρικά) και οργανικό άζωτο με τη μορφή σύνθετων οργανικών ενώσεων (π.χ. αμινοξέα, πρωτεΐνες). Η εκροή από τις περισσότερες εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων, παρουσιάζει επίσης σημαντικά ποσά αζώτου, συνήθως με τη μορφή της αμμωνίας ή με τη μορφή νιτρικών για τις περιπτώσεις που η εγκατάσταση σχεδιάστηκε για να επιτυγχάνει νιτροποίηση. Η αντίδραση γενικά του χλωρίου με ενώσεις που περιέχουν άτομα αζώτου ενωμένα με ένα ή και περισσότερα άτομα υδρογόνου σχηματίζει χλωρο-αζωτούχες ενώσεις οι οποίες είθισται να αποκαλούνται χλωραμίνες. Υπάρχουν γενικά δύο κατηγορίες χλωραμινών (οι οργανικές και οι ανόργανες). Οι ανόργανες χλωραμίνες σχηματίζονται από την αντίδραση του χλωρίου με την αμμωνία που εμπεριέχεται στο νερό ή τα απόβλητα. Όταν το νερό ή τα απόβλητα εμπεριέχουν οργανικό άζωτο, αυτό αντιδρά άμεσα με το ελεύθερο χλώριο (υποχλωριώδες οξύ) σχηματίζοντας οργανοχλωραμίνες, οι οποίες δεν εμφανίζουν μικροβιοκτόνο (απολυμαντική) δράση (White, 1999).

Επειδή το υποχλωριώδες οξύ είναι ισχυρά οξειδωτικό μέσο, αντιδρά άμεσα με την αμμωνία των λυμάτων και σχηματίζει τρεις μορφές χλωραμινών, οι οποίες παρουσιάζουν και αυτές απολυμαντική δράση αλλά πολύ βραδύτερη:



Το χλώριο με τη μορφή των χλωραμινών, αποτελεί το “**ενωμένο διαθέσιμο χλώριο**” και το σύνολο του ελεύθερου και ενωμένου αποτελεί το “**ολικό διαθέσιμο χλώριο**” ή ισοδύναμα το “**υπολειμματικό χλώριο**”.

Οι παραπάνω αντιδράσεις είναι ανταγωνιστικές και εξαρτώνται έντονα από το pH, τη θερμοκρασία, το χρόνο επαφής, τον αρχικό λόγο χλωρίου/αμμωνίας και περισσότερο από όλα από την αρχική συγκέντρωση του χλωρίου και του αμμωνιακού αζώτου. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι η πρώτη αντίδραση μετατρέπει συνολικά το ελεύθερο διαθέσιμο χλώριο σε μονοχλωραμίνη σε pH = 7 ή 8 όταν ο λόγος χλωρίου /αμμωνίας είναι μικρότερος ή ίσος του 5:1 (κ.β.). Ο ρυθμός της πρώτης αντίδρασης είναι εξαιρετικά σημαντικός καθώς εξαρτάται από το pH, με τη μέγιστη μετατροπή του HOCl σε NH₂Cl να παρατηρείται για τιμή του pH = 8,3. Επιπλέον, ο ρυθμός της αντίδρασης μειώνεται με την πτώση της θερμοκρασίας και ενδεικτικά αναφέρουμε ότι για pH = 7 και 0 °C απαιτούνται περίπου 5 min για την επίτευξη 90% μετατροπής του HOCl σε NH₂Cl, ενώ ο αντίστοιχος χρόνος σε θερμοκρασία 25 °C είναι μόλις 0,2 sec. Ο ρυθμός της δεύτερης αντίδρασης είναι σημαντικά μικρότερος (απαίτηση 1 hr για μετατροπή 90 % και ως και 5 hr για τιμές pH > 8,5 σε χαμηλές συγκεντρώσεις αμμωνιακού αζώτου). Καθώς το pH τείνει στο 5, ο ρυθμός της δεύτερης αντίδρασης αυξάνει σημαντικά (White, 1999).

Όταν το νερό ή τα απόβλητα εμπεριέχουν εκτός του ανόργανου και οργανικό άζωτο η διεργασία της χλωρίωσης παρουσιάζει κάποια πρόσθετα προβλήματα. Το αμμωνιακό άζωτο γενικά καταναλώνεται σχεδόν πλήρως σε χρονικό διάστημα μιας ώρας. Το άζωτο των αμινοξέων από την άλλη καταναλώνεται πολύ πιο αργά σε ένα μεγάλο χρονικό διάστημα (αρκετές ώρες). Το άζωτο των πρωτεϊνών καταναλώνεται αμελητέα ακόμη και μετά από πολλές ημέρες. Η διαφοροποίηση λοιπόν της αντίδρασης του χλωρίου με το άζωτο της αμμωνίας σε σχέση με το οργανικό άζωτο έγκειται στο χρόνο, στο βαθμό κατανάλωσης του αζώτου και στο σχηματισμό σύνθετων οργανικών χλωραμινών (White, 1999).

4.2.3. Σημείο θραύσης χλωρίωσης

Η διατήρηση υπολειμματικού χλωρίου (ελεύθερου ή δεσμευμένου) κατά την απολύμανση λυμάτων, είναι ιδιαίτερα σύνθετο πρόβλημα καθώς το ελεύθερο χλώριο δεν αντιδρά μόνο με την αμμωνία, σύμφωνα με όσα αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο, αλλά αποτελεί γενικότερα ένα ισχυρά οξειδωτικό μέσο. Ο όρος “**σημείο θραύσης χλωρίωσης**”,

χρησιμοποιείται όταν προστίθεται αρκετή ποσότητα χλωρίου, ικανή να αντιδράσει με όλους τους οξειδώσιμους παράγοντες, ώστε αν προστεθεί επιπλέον ποσότητα να παραμείνει ως ελεύθερο χλώριο. Ο κύριος λόγος για τον οποίο προστίθεται ικανή ποσότητα χλωρίου ώστε τελικά να ανιχνεύεται υπολειμματικό ελεύθερο χλώριο, είναι διότι μόνο τότε διασφαλίζεται η πλήρης απολύμανση (Metcalf & Eddy, 2003). Τα βήματα που παρατηρούνται κατά την διοχέτευση χλωρίου στα λύματα που εμπεριέχουν αμμωνία και άλλα οξειδώσιμα συστατικά, μπορούν να αναλυθούν από την παρατήρηση του Σχήματος 4.2.

Τμήμα AB: Το συνολικό χλώριο που διατίθεται καταναλώνεται αποκλειστικά για την οξείδωση των εύκολα οξειδώσιμων συστατικών των λυμάτων (όπως Fe^{2+} , Mn^{2+} , H_2S), με αποτέλεσμα να μην εμφανίζεται καθόλου υπολειμματικό χλώριο (δεν περισσεύει απολυμαντική δράση). Για παράδειγμα το H_2S το οποίο εμφανίζεται στα απόβλητα αλλά και ορισμένες φορές σε υπόγεια νερά, αντιδρά ακαριαία με το χλώριο και είτε σχηματίζει ένα ίζημα θείου είτε ένα αραιό διάλυμα θειικού οξέος, ανάλογα με το pH που επικρατεί. Οι διαλυτές ενώσεις μαγνησίου, οξειδώνονται από το χλώριο σχηματίζοντας διοξείδιο του μαγνησίου σε σχετικά υψηλές τιμές του pH (βέλτιστη τιμή κοντά στο 10). Απαιτείται συνήθως χρονικό διάστημα δύο έως και τέσσερις ώρες για την ολοκλήρωση της αντίδρασης. Επίσης, διαπιστώθηκε πως οι χλωραμίνες παρουσιάζουν αμελητέα επίδραση στις ενώσεις μαγνησίου. Το ποσό του χλωρίου που αντιδρά με τις ενώσεις αυτές, πριν αρχίσει η καθαρά απολυμαντική δράση, λέγεται *απαιτούμενο χλώριο* (White, 1999).

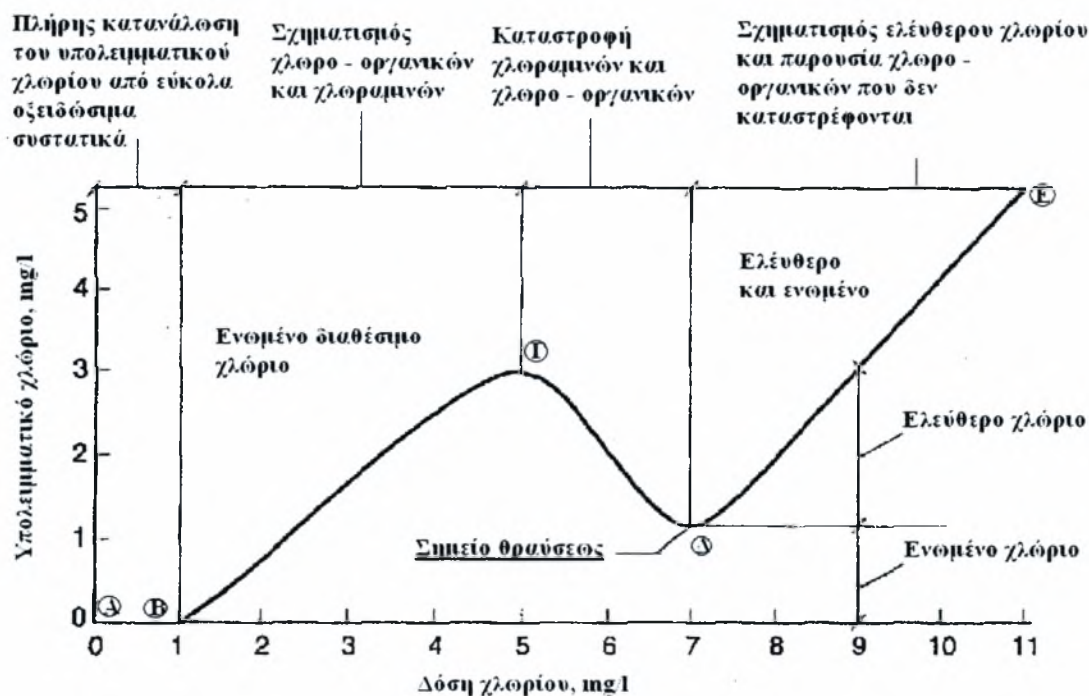
Τμήμα BG: Η παραπέρα προσθήκη χλωρίου έχει σαν αποτέλεσμα τον σχηματισμό χλωραμινών, ως συνέπεια της αντίδρασής του με την αμμωνία και τα αμμωνιακά άλατα των λυμάτων, ενώ το χλώριο ανάγεται σε χλωριούχα. Συνεπώς, διακρίνεται μια συνεχής αύξηση του ενωμένου διαθέσιμου χλωρίου μέχρι το σημείο Γ.

Τμήμα ΓΔ: Η συνέχιση προσθήκης χλωρίου έχει ως αποτέλεσμα την μερική μετατροπή των χλωραμινών σε τριχλωριούχο άζωτο, ενώ το υπόλοιπο μέρος των χλωραμινών οξειδώνεται προς άζωτο και οξείδια του αζώτου. Το ενωμένο διαθέσιμο χλώριο απομειώνεται μέχρι το οριακό σημείο Δ.

Τμήμα ΔΕ: Το επιπλέον χλώριο μετά το σημείο Δ, οδηγεί σε ευθέως αναλογική αύξηση του ελεύθερου διαθέσιμου χλωρίου (ως υποχλωριώδες). Θεωρητικά το κλάσμα βάρους του χλωρίου ως προς το αμμωνιακό άζωτο στο σημείο θραύσεως Δ είναι 7,6 προς 1. Το κλάσμα βάρους, για την προσέγγιση του σημείου Β, είναι περίπου 5 προς 1.

Ο επιθυμητός βαθμός απολύμανσης εξασφαλίζεται καλύτερα με το ελεύθερο χλώριο, γεγονός που επιβάλλει η προστιθέμενη στα λύματα ποσότητα χλωρίου να είναι τέτοια ώστε

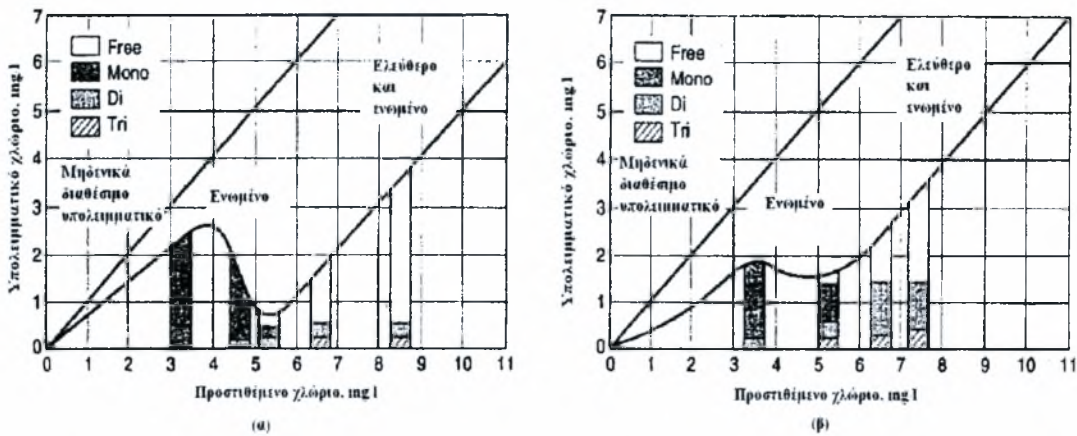
να ικανοποιούνται οι απαιτήσεις σε χλώριο της περιοχής ΑΒΓΔ και να συνεχίζεται η χλωρίωση στην περιοχή ΔΕ με το ελεύθερο χλώριο (Στάμου & Βογιατζής, 1994).



Σχήμα 4.2 : Υπολειμματικό χλώριο κατά τη χλωρίωση αστικών λυμάτων (Metcalf & Eddy, 2003)

Περιστασιακά, παρατηρούνται σοβαρά προβλήματα οσμών κατά τη διάρκεια της διεργασίας της χλωρίωσης στο σημείο θραύσεως, ως αποτέλεσμα του σχηματισμού τριχλωριούχου αζώτου και συναφών ενώσεων. Η παρουσία πρόσθετων ενώσεων που αντιδρούν με το χλώριο, όπως το οργανικό άζωτο, μπορούν να επηρεάσουν το σχήμα της καμπύλης θραύσεως (απουσία του κλασικού βυθίσματος της καμπύλης) (Metcalf & Eddy, 2003).

Όπως μπορεί να δει κανείς από την παρατήρηση του Σχήματος 4.3, η απομείωση του ενωμένου χλωρίου μετά την κορυφή της καμπύλης είναι μικρή και αυτό σημαίνει δύο πράγματα: α) συνεχής και ανταγωνιστικές αντιδράσεις μεταξύ μονοχλωραμινών και διχλωραμινών και β) πολύ μικρή απώλεια αζώτου.



Σχήμα 4.3 : Υπολειμματικό χλώριο κατά τη χλωρίωση αστικών λυμάτων για: (α) αστικά λύματα που περιέχουν αμμωνιακό άζωτο και (β) για αστικά λύματα που περιέχουν άζωτο με τη μορφή αμμωνίας και ως οργανικό άζωτο (Metcalf & Eddy, 2003)

4.3. Μηχανισμός της απολυμαντικής δράσης του χλωρίου

Πολλές μελέτες έχουν διεξαχθεί για την κατανόηση του μηχανισμού της απολυμαντικής δράσης των διαφόρων μορφών του χλωρίου στα βακτήρια, τις κύστες και τα σπόρια. Ο τρόπος με τον οποίο το χλώριο και οι υπόλοιπες μορφές του χλωρίου καταστρέφουν τους μικροοργανισμούς δεν είναι απόλυτα εξακριβωμένος και αποτελεί ακόμη και σήμερα ένα θέμα έρευνας. Μόλις το 1910, επικράτησε η άποψη πως η απολυμαντική ισχύς που εμφάνιζε το χλώριο οφειλόταν αποκλειστικά και μόνο στην απελευθέρωση ατομικού οξυγόνου από το υποχλωριώδες οξύ, που παράγεται όπως αναφέραμε από την υδρόλυση του χλωρίου στο νερό. Η άποψη αυτή απορρίφθηκε πολλά χρόνια αργότερα όταν ο Ghang το 1944 διαπίστωσε πως το υπεροξείδιο του υδρογόνου και το υπερμαγγανικό κάλιο, ενώ απελευθέρωναν σημαντικές ποσότητες στοιχειακού οξυγόνου, παρουσίαζαν εξαιρετικά περιορισμένη απολυμαντική ισχύ (White, 1999).

Όλα τα βακτήρια εμφανίζουν την ίδια σύσταση και συγκεκριμένα εμπεριέχουν κάποια ή όλα από τα ακόλουθα συστατικά: ένα μέσο απορρόφησης της τροφής, μηχανισμό απόρριψης των αποβλήτων, κινητικότητα και ικανότητα αναπαραγωγής. Επιπλέον είναι μονοκύτταρα και εμφανίζουν μια λεπτή επικάλυψη στο εξωτερικό του κυτταρικού τους τοιχώματος. Η εξωτερική αυτή επικάλυψη του κυτταρικού τοιχώματος των βακτηρίων έχει αρνητικό φορτίο γεγονός που επεξηγεί την διαφορετική απολυμαντική ισχύ των διαφόρων μορφών ελεύθερου και ενωμένου χλωρίου. Στη διεργασία της απολύμανσης το απολυμαντικό έχει ως στόχο την διακοπή της κανονικής διεργασίας της ζωής του οργανισμού. Για τα

βακτήρια η πιο πιθανή εξήγηση είναι ότι το χλώριο διαπερνά την κυτταρική μεμβράνη τους και αδρανοποιεί ορισμένα ένζυμα που είναι απαραίτητα για τη ζωή τους (AWWA, 1996).

Στο συμπέρασμα αυτό κατέληξαν πρώτοι το 1946 οι Green και Stumpf οι οποίοι έδειξαν πως το βακτηριακό αιώρημα γίνεται στην πραγματικότητα στείρο όταν τα βακτήρια χάσουν την ικανότητά τους να παράγουν γλυκόζη. Επίσης, καταλήξαν πως όταν τα ένζυμα, που εμπεριέχουν υδροθεικές ομάδες, οξειδώνονται από το χλώριο, η οξείδωση είναι αναντιστρεπτή, εκμηδενίζοντας έτσι την ενζυματική δράση που συντελεί στην θανάτωση των βακτηρίων. Συνταυτιζόμενοι με αυτή την άποψη οι Ingols et al. το 1953 παρατήρησαν πως όταν χρησιμοποιείται μονοχλωραμίνη, η επαναφορά της υδροθεικής ομάδας δεν οδηγούσε σε αντίστοιχη επαναφορά των βακτηρίων, γεγονός που κατέδειξε πως εκτός της υδροθεικής ομάδας που είναι εξαιρετικά ευαίσθητη σε ένα ισχυρό οξειδωτικό και κάποιες άλλες ομάδες επηρεάζονται και συντελούν στην θανάτωση των βακτηρίων (White, 1999).

Τα απαραίτητα για το μεταβολισμό ένζυμα βρίσκονται σε πολύ μικρές ποσότητες, γεγονός που εξηγεί την υψηλή μικροβιοκτόνο δράση του χλωρίου σε πολύ μικρές συγκεντρώσεις. Εναλλακτικά, είναι δυνατόν το χλώριο να αντικαταστήσει ένα από τα υδρογόνα των αμινοομάδων των πρωτεϊνών των κυττάρων, οπότε η χλωραμίνη που σχηματίζεται είναι τοξική και επιφέρει το θάνατο. Επιπρόσθετα, το ατομικό οξυγόνο που σχηματίζεται κατά τη διάλυση των οξειδωτικών στο νερό, είναι δυνατόν να αντιδράσει με ακόρεστα συστατικά του πρωτοπλάσματος του κυττάρου και να επιφέρει επίσης τη θανάτωσή του (Μήτρακας, 1996).

Για τους ιούς και ορισμένους άλλους μικροοργανισμούς (μ/ο) η πιο πιθανή εξήγηση είναι ότι το χλώριο επιδρά απευθείας στο DNA και RNA του πυρήνα τους (Στάμου & Βογιατζής, 1994).

Η διαφορετική σχετική αντίσταση των παθογόνων μικροοργανισμών (κατά φθίνουσα σειρά ανθεκτικότητας: σπόρια, πρωτόζωα, ιοί και βακτήρια) στην απολύμανση οφείλεται κατά κύριο λόγο σε διαφορές στην κυτταρική τους δομή (Μήτρακας, 1996).

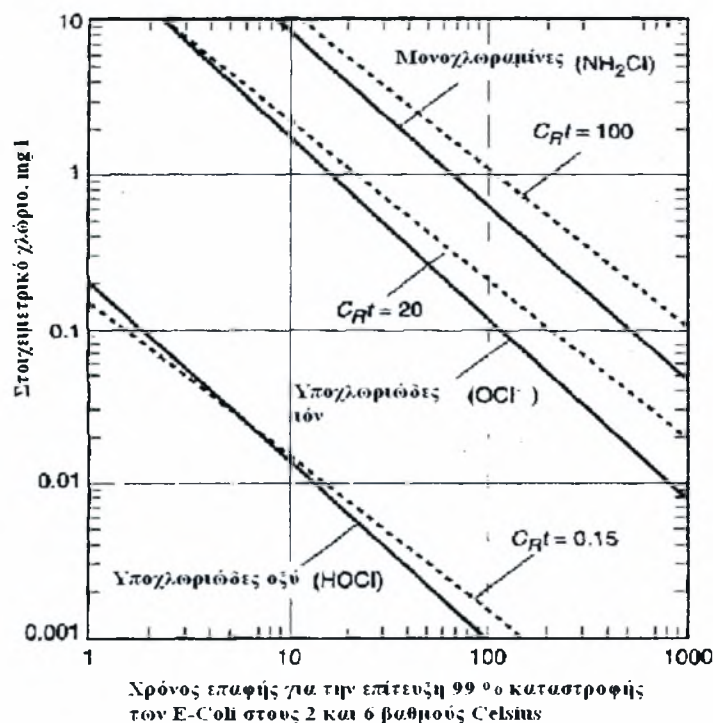
4.4. Σύγκριση της μικροβιοκτόνου δράσης των διαφόρων μορφών του χλωρίου

Στο σημείο αυτό θα γίνει μια σύντομη σύγκριση της μικροβιοκτόνου δράσεως που εμφανίζει το ελεύθερο και ενωμένο χλώριο. Το υποχλωριώδες οξύ, που σχηματίζεται από την προσθήκη αερίου χλωρίου ή από την προσθήκη υποχλωριωδών διαλυμάτων στο νερό, είναι ηλεκτρικά ουδέτερο. Το προϊόν της αντίδρασης ιονισμού OCl^- είναι αρνητικά φορτισμένο, ενώ οι χλωραμίνες είναι επίσης ηλεκτρικά ουδέτερες. Συνεπώς, για τα βακτήρια τα οποία

όπως προαναφέρθηκε έχουν αρνητικό φορτίο στο εξωτερικό της κυτταρικής τους μεμβράνης, οποιοδήποτε απολυμαντικό μέσο που φέρει θετικό ή ουδέτερο ηλεκτρικό φορτίο, διαπερνά την λεπτή επικάλυψη του κυτταρικού τους τοιχώματος πολύ πιο γρήγορα, διότι συναντά πολύ μικρότερη αντίσταση. Το OCl^- , ως ομώνυμα φορτισμένο, συναντά την υψηλότερη αντίσταση γεγονός που επεξηγεί την μειωμένη του απολυμαντική ισχύ.

Εκτός όμως του φορτίου, η ικανότητα διάρρηξης της λεπτής επικάλυψης εξαρτάται και από το μέγεθος του μορίου. Το υποχλωριώδες οξύ είναι το λιγότερο σύνθετο μόριο και ως εκ τούτο διαπερνά πολύ πιο εύκολα την επικάλυψη απ' ό,τι οι χλωραμίνες που είναι γενικά πιο σύνθετα μόρια. Αυτός είναι και ο λόγος που παρόλο που τόσο το υποχλωριώδες οξύ όσο και οι χλωραμίνες είναι ηλεκτρικά ουδέτερες ενώσεις, το πρώτο παρουσιάζει σημαντικά βελτιωμένη απολυμαντική δράση (AWWA, 1973 & 1996).

Η σύγκριση της μικροβιοκτόνου δράσεως του υποχλωριώδους οξέος HOCl , του ιόντος OCl^- και των μονοχλωραμινών NH_2Cl παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.4. Για δεδομένο χρόνο επαφής ή για δεδομένη ποσότητα υπολειμματικού χλωρίου, η μικροβιοκτόνος δράση του υποχλωριώδους οξέος, είναι εξαιρετικά μεγαλύτερη από την αντίστοιχη του υποχλωριώδους ιόντος και των μονοχλωραμινών για τους λόγους που αναπτύχθηκαν προηγουμένως.



Σχήμα 4.4: Σύγκριση μικροβιοκτόνου δράσης υποχλωριώδους οξέος, υποχλωριώδους ιόντος και μονοχλωραμινών, για 99 % καταστροφή των *E.Coli* στους 2 και 6 °C (Metcalf & Eddy, 2003)

Αξίζει να αναφερθεί ότι για ένα σχετικά υψηλό χρονικό διάστημα επαφής (45-60 min), οι μονοχλωραμίνες είναι σχεδόν εξίσου αποτελεσματικές με το ελεύθερο χλώριο, αναφορικά με την θανάτωση των κολοβακτηριδίων.

Στο σημείο αυτό πρέπει επίσης να αναφέρουμε πως οι διχλωραμίνες είναι περίπου δύο φορές πιο αποτελεσματικές ως μικροβιοκτόνοι παράγοντες σε σχέση με τις μονοχλωραμίνες. Για παράδειγμα οι Fair et al. δείχνανε πως για $pH \sim 4,5$, όπου παρατηρείται αποκλειστικά 100% διχλωραμίνη, απαιτούνται περίπου 2 mg/l υπολειμματικού χλωρίου, για να επιτευχθεί 100% καταστροφή των κυστών, ενώ για $pH \sim 10$, όπου εμφανίζεται αποκλειστικά μονοχλωραμίνη, απαιτούνται περίπου 7,5 mg/l. Παρόμοιες παρατηρήσεις γίνανε και από άλλους ερευνητές ωστόσο η γενίκευση της παρατήρησης χρήζει επιπλέον επιβεβαίωσης (White, 1999).

4.5. Απαίτηση σε χλώριο – Ο κανόνας $C * t$

Η ποσότητα χλωρίου που πρέπει να προστίθεται για να επιτευχθεί ένα ικανοποιητικό επίπεδο υπολειμματικού χλωρίου καλείται “ απαίτηση χλωρίου ” (Metcalf & Eddy, 2003).

Ειδικότερα για την απολύμανση των λυμάτων, η απαιτούμενη δόση χλωρίου εξαρτάται από το είδος και την επεξεργασία καθαρισμού των λυμάτων, σε συνδυασμό με τους ισχύοντες τοπικούς κανονισμούς και τον απαιτούμενο βαθμό προστασίας του τελικού αποδέκτη. Είναι λοιπόν αδύνατο να καθοριστούν με ακρίβεια οι απαιτούμενες δόσεις, ιδιαίτερα αν επιβάλλεται σοβαρή ελάττωση του μικροβιακού πληθυσμού και ως εκ τούτο κρίνεται σκόπιμο να προηγείται σχετική εργαστηριακή έρευνα ή μεγαλύτερης κλίμακας κατευθυντήρια εγκατάσταση (pilot plant), προκειμένου να καθοριστούν η δόση, τα χαρακτηριστικά παροχής των διατάξεων χλωρίωσης και ο όγκος της δεξαμενής επαφής. (Μαρκαντωνάτος, 1990)

Πιο αναλυτικά, ο αρχικός αριθμός μικροοργανισμών (μ/o) N_0 και ο αριθμός μ/o μετά την χλωρίωση N_t (επιθυμητή συγκέντρωση που υπαγορεύεται από τους κανονισμούς) καθορίζουν το γινόμενο $C * t$, μετά από τον πειραματικό προσδιορισμό της σχέσης $N_t/N_0 - C*t$, για ένα συγκεκριμένο απόβλητο. Ο βέλτιστος συνδυασμός των C & t αποτελεί αντικείμενο τεχνοοικονομικής ανάλυσης. Εδώ πρέπει να ξεκαθαρίσουμε ότι στην συνηθισμένη πρακτική δεν υπάρχουν άπειροι συνδυασμοί των C & t καθώς ο συνήθης χρόνος παραμονής στις δεξαμενές επαφής κυμαίνεται από 15 – 30 min στη μέγιστη παροχή, ενώ ανάλογα με το είδος των λυμάτων οι συνήθεις δόσεις χλωρίου δίνονται στον Πίνακα 4.1 (Στάμου & Βογιατζής, 1994).

Πίνακας 4.1 : Τυπικές συγκεντρώσεις (δόσεις) χλωρίου

Είδος Αποβλήτου	Δόση Cl ₂ (mg/l)
Ανεπεξέργαστα	6-12
Ανεπεξέργαστα (σηπτικά)	12-25
Από πρωτοβάθμια καθίζηση	3-20
Από πρωτοβάθμια φυσικοχημική καθίζηση	2-12
Από βιολογικό φίλτρο	3-15
Από συστήματα ενεργού ιλύος	2-9

Η ποσοτικοποίηση της επιτυχούς απολύμανσης εκφράζεται λοιπόν με τον **κανόνα C*t**, όπου C είναι η ελάχιστη συγκέντρωση υπολειμματικού απολυμαντικού που μετράται στην έξοδο της δεξαμενής και t ο ελάχιστος χρόνος επαφής. Σύμφωνα με αυτή την προσέγγιση, το γινόμενο C*t, πρέπει να υπερβαίνει μια τιμή που γενικά εξαρτάται από τον τύπο του απολυμαντικού που χρησιμοποιείται, καθώς και από το pH και τη θερμοκρασία, για να επιτευχθεί ένα επιθυμητό ποσοστό απολύμανσης ενός συγκεκριμένου τύπου μ/ο, μετρούμενο με τους πρότυπους ρυθμούς απενεργοποίησης (κινητικά μοντέλα απολύμανσης, βλ. παράγραφο 5.6).

Συνήθως, γίνεται χρήση της ποσότητας t_{10} που αποτελεί τον υδραυλικό χρόνο επαφής. Πιο αναλυτικά, ως t_{10} ορίζεται ο χρόνος παραμονής του 10 % των μ/ο, δηλαδή ο χρόνος που απαιτείται για το 10% των μ/ο να ταξιδέψουν διαμέσου της δεξαμενής και να εξέλθουν από αυτή. Στις πραγματικές δεξαμενές επαφής, ο t_{10} είναι μικρότερος από τον μέσο υδραυλικό χρόνο παραμονής $t_{\text{μέσο}}$, ο οποίος ορίζεται ως ο λόγος του όγκου της δεξαμενής προς την ογκομετρική ροή (Hannoun *et al.*, 1998).

Θα μπορούσε κανείς να ισχυριστεί ότι αυξάνοντας τη δόση του απολυμαντικού θα μπορούσαμε να επιτύχουμε την επιθυμητή απολύμανση. Ωστόσο, αυτό θα οδηγούσε σε αύξηση του λειτουργικού κόστους της εγκατάστασης και παράλληλα θα αύξανε τον κίνδυνο σχηματισμού ανεπιθύμητων παραπροϊόντων (οργανικά παραπροϊόντα χλωρίωσης – CBP). Συνεπώς, για τη βελτιστοποίηση της απόδοσης της απολύμανσης απαιτείται η αύξηση του t_{10} με παράλληλη μείωση της απαιτούμενης δόσης απολυμαντικού. Όσο πιο μεγάλος είναι ο λόγος $t_{10}/t_{\text{μέσο}}$ τόσο πιο αποτελεσματική θεωρείται η δεξαμενή επαφής. Για την επίτευξη του προαναφερόμενου στόχου θα μπορούσε να αυξηθεί ο όγκος της δεξαμενής επαφής αυξάνοντας π.χ. το μήκος των διαμερισμάτων, ωστόσο κάτι τέτοιο θα συντελούσε στην αύξηση της αρχικής επένδυσης για την κατασκευή και των δαπανών συντήρησης. Ένας πιο αποτελεσματικός τρόπος για να αυξηθεί η ποσότητα t_{10} , είναι να αυξηθεί η ομοιομορφία της ροής. Το μέγιστο t_{10} ισούται με το $t_{\text{μέσο}}$, όταν όλα τα σωματίδια εισέρχονται στη δεξαμενή σε

μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή, ρέουν παράλληλα διαμέσου της δεξαμενής και εξέρχονται ταυτόχρονα (συνθήκες εμβολικής ροής – **plug flow**). Για το λόγο αυτό καθώς και για το γεγονός ότι οι περισσότερες χημικές αντιδράσεις ολοκληρώνονται επιτυχώς σε αντιδραστήρες εμβολικής ροής (Wang et al., 2003) οδήγησε στο σχεδιασμό των δεξαμενών χλωρίωσης κατά τρόπο τέτοιο ώστε να προσεγγίζονται κατά το δυνατόν συνθήκες εμβολικής ροής (Hannoun et al., 1998).

Στην επόμενη παράγραφο γίνεται μια αναλυτική παρουσίαση των εναλλακτικών σχεδιασμών έγχυσης απολυμαντικού, των θαλάμων αρχικής ανάμιξης και της διαμόρφωσης του κυρίως τμήματος των δεξαμενών επαφής.

4.6. Διαμόρφωση δεξαμενών επαφής

Το κύριο μέλημα κατά τον σχεδιασμό των δεξαμενών χλωρίωσης, είναι η διασφάλιση ότι ένα συγκεκριμένο ποσοστό της συνολικά εισερχόμενης παροχής θα παραμένει στην δεξαμενή, για τον σχεδιαστικό χρόνο παραμονής. Αυτό συντελείτε με την προσέγγιση κατά το δυνατόν συνθηκών εμβολικής ροής, σε δεξαμενές επαφής με σειρά από αλληλοσυνδεδεμένα διαμερίσματα.

Οι υφιστάμενες δεξαμενές χλωρίωσης στις διάφορες εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων στον Ελλαδικό χώρο έχουν συνήθως μαιανδρική κάτοψη με μεγάλους λόγους μήκους : πλάτους, ώστε να επιτυγχάνεται σε αυτές ομοιόμορφη, παράλληλη ροή, που έχει διαπιστωθεί ότι επιδρά ευεργετικά στην απόδοση της χλωρίωσης. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα ενός τέτοιου σχεδιασμού δίνεται στο Σχήμα 4.5.



Σχήμα 4.5: Δεξαμενή χλωρίωσης ΕΕΑ Δήμου Αλμυρού και ευρείας περιοχής

Η χρήση διαχωριστικών τοιχίων καθώς και η διαμόρφωση της εισόδου και της εξόδου της δεξαμενής επαφής συντελούν στην ανάπτυξη μιας πιο σύνθετης ροής όπου παρατηρούνται φαινόμενα τυρβώδους ανάμιξης, νεκρών ζωνών και ανακυκλοφοριών. Η παρουσία νεκρών ζωνών ή/και ανακυκλοφοριών, απαιτούν συνήθως την αύξηση της δόσης του προστιθέμενου χλωρίου, για τη διατήρηση της απόδοσης της διεργασίας της απολύμανσης, γεγονός που συνεπάγεται την αύξηση του λειτουργικού κόστους. Πιο ανησυχητική είναι η αναποτελεσματική χρήση του χλωρίου καθώς σχηματίζονται πιθανές καρκινογόνες ενώσεις, ως προϊόν του υπολειμματικού χλωρίου στη δεξαμενή. Επιπλέον, η παρουσία κάποιων παρακάμψεων (by pass) της ροής, συντελούν στην ελλιπή χλωρίωση τμήματος της ροής που εξέρχεται από τη δεξαμενή, με αποτέλεσμα να μην τηρείται το επιθυμητό επίπεδο απομείωσης σε μO , με σοβαρούς κινδύνους για τη δημόσια υγεία. Συνεπώς, η κατανόηση της υδροδυναμικής των δεξαμενών χλωρίωσης είναι απαραίτητη για τον ορθό σχεδιασμό και τον περιορισμό των προαναφερόμενων αστοχιών (Falconer & Ismail, 1997).

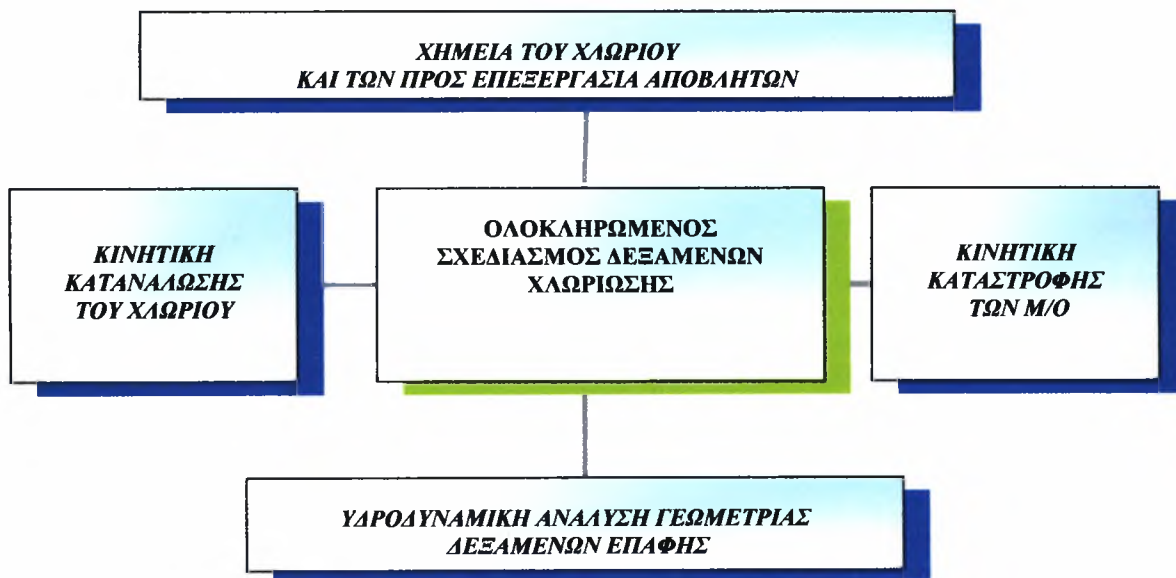
4.7. Ολοκληρωμένος σχεδιασμός δεξαμενών χλωρίωσης

Ο ολοκληρωμένος και επιτυχής σχεδιασμός των διεργασιών απολύμανσης με χλώριο, απαιτεί την ενοποιημένη και ολοκληρωμένη διερεύνηση των ακόλουθων τεσσάρων παραμέτρων:

- Χημεία του χλωρίου και του προς επεξεργασία νερού/λύματος. Η διεργασία της απολύμανσης επηρεάζεται όπως είδαμε σημαντικά τόσο από τα φυσικά όσο και από τα βιολογικά χαρακτηριστικά του νερού, όπως τα αιωρούμενα στερεά, τη θερμοκρασία, το pH, τις οξειδώσιμες ουσίες κ.α.
- Κινητική της κατανάλωσης του χλωρίου. Περιγράφεται γενικά από δύο στάδια, ένα αρχικό ακαριαίο γνωστό ως άμεσης ζήτησης και ένα δεύτερο αργό στάδιο που συνήθως μοντελοποιείται με μια κινητική πρώτης τάξης. Οι αναλυτικές εκφράσεις που έχουν προταθεί για την περιγραφή της κινητικής της κατανάλωσης του χλωρίου παρουσιάζονται στο επόμενο κεφάλαιο.
- Κινητική αδρανοποίησης των μικροοργανισμών. Περιγράφεται συνήθως από κινητικές πρώτης τάξης (π.χ. μοντέλο Chick – Watson). Ωστόσο, στην πράξη τα συστήματα

απολύμανσης σπάνια ταυτίζονται με κινητικές πρώτης τάξης γεγονός που οδήγησε στην εξαγωγή περισσότερο σύνθετων μοντέλων (π.χ. μοντέλο του Hom, μοντέλο πολλαπλών στόχων, μοντέλο σειριακών γεγονότων κ.α.). Οι αναλυτικές εκφράσεις που έχουν προταθεί για την περιγραφή της κινητικής της αδρανοποίησης των μικροοργανισμών παρουσιάζονται επίσης στο επόμενο κεφάλαιο.

- Υδραυλική / υδροδυναμική ανάλυση της σύνθετης γεωμετρίας (κυρίως στα σημεία εισόδου, στα σημεία εκτροπής της ροής και στα σημεία εξόδου) των δεξαμενών επαφής.



Σχήμα 4.6: Ολοκληρωτικός σχεδιασμός δεξαμενών επαφής

5. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ

5.1. Εισαγωγή

Ο σχεδιασμός των αντιδραστήρων στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας του πόσιμου νερού ή/και των αστικών λυμάτων αποτελεί ένα πρόβλημα μηχανικής. Στη μηχανική, εξαιτίας της πολυπλοκότητας των προβλημάτων που πρόκειται να επιλυθούν, η κλασική προσέγγιση βασίζεται κυρίως σε σφαιρική επίλυση των εξισώσεων που διέπουν τα φαινόμενα ροής και μεταφοράς. Ειδικότερα, η μηχανική ανάλυση των διεργασιών περιορίζεται στα ισοζύγια μάζας ή γραμμομορίων και τελικά στα ισοζύγια ενέργειας ή ενθαλπίας. Το ισοζύγιο ορμής από την άλλη περιορίζεται συνήθως σε εκτίμηση της πτώσης πίεσης. Η σφαιρική αυτή προσέγγιση οδηγεί σε απλές έννοιες που επιβεβαιώνονται στην ανάλυση συγκεκριμένου εξοπλισμού. Το κύριο πλεονέκτημα της προσέγγισης αυτής είναι η απλότητα και η ευρεία χρησιμότητά της. Ωστόσο, τέτοιου είδους σχέσεις είναι εμπειρικές και είναι δύσκολο να εξάγουν συμπεράσματα.

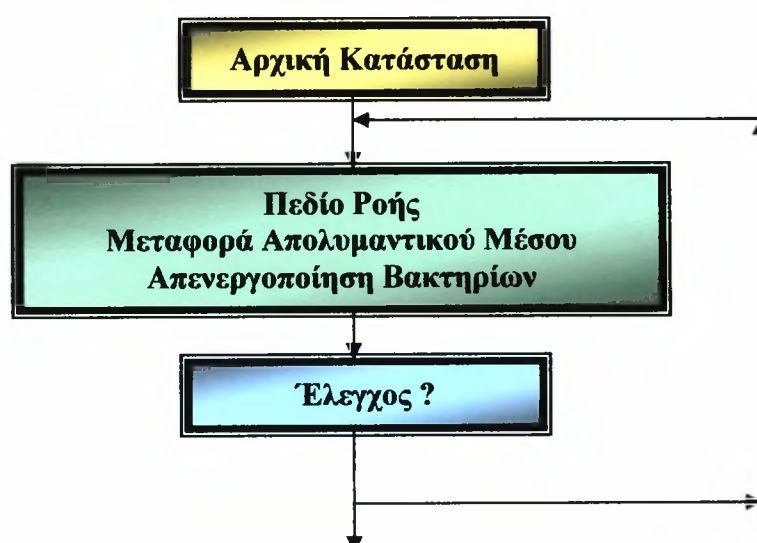
Η συνεχώς αυξανόμενη υπολογιστική ισχύς οδήγησε στην καθιέρωση της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) ως ένα αποτελεσματικό εργαλείο στην ανάλυση της συμπεριφοράς του σύνθετου εξοπλισμού. Η υπολογιστική ρευστοδυναμική βασίζεται γενικά στην αριθμητική επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDE's) οι οποίες περιγράφουν την διατήρηση μάζας, ορμής και ενέργειας. Οι εξισώσεις όμως αυτές εμπεριέχουν κάποιους φαινομενολογικούς όρους που πρέπει να μοντελοποιηθούν σωστά ώστε να καταστεί δυνατή μια επιτυχής προσομοίωση. Στην στρωτή περιοχή οι γνωστοί νόμοι των Newton, Fick και Fourier επιτρέπουν την ορθή μοντελοποίηση της μοριακής διάχυσης της ορμής, της μάζας και της θερμότητας, αντίστοιχα. Στην τυρβώδη περιοχή ωστόσο, οι τυρβώδεις τάσεις είναι δύσκολο να εκτιμηθούν και για το λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί ποικίλα μοντέλα, που ξεκινούν από απλές αλγεβρικές εξισώσεις και φτάνουν έως και ένα σετ από επτά επιπλέον PDE's.

Η ακρίβεια μιας CFD προσομοίωσης εξαρτάται στενά από το βαθμό γνώσης των τοπικών φαινομένων, που ελέγχουν τη συμπεριφορά του αντιδραστήρα. Το κύριο πλεονέκτημα της CFD ανάλυσης είναι η δυνατότητα που έχει να συμπεριλάβει τα φαινόμενα μικρής κλίμακας (δυνατότητα προσομοίωσης τόσο της μικρής κλίμακας – εργαστηριακές πιλοτικές μονάδες- όσο και των μεγάλων κλιμάκων – πραγματικούς βιομηχανικούς αντιδραστήρες - χωρίς την χρήση νόμων μεγέθυνσης υπό κλίμακα) (Do-Quang et al., 1999).

Η υπολογιστική ρευστοδυναμική δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να ξεκινήσει την αριθμητική του διεργασία και να καταγράψει τα αποτελέσματά του ακριβώς με τον ίδιο τρόπο που αναλύεται η ροή εργαστηριακά. Το πλεονέκτημα του χρήστη είναι ο πλήρης έλεγχος των παραμέτρων που υπεισέρχονται στον υπολογισμό της ροής, το οποίο δεν είναι πάντοτε εφικτό στο εργαστήριο. Επιπλέον, μετά την ωρίμανση και την επαλήθευση του μοντέλου του, μπορεί να “*διεξάγει*” παραμετρικές μελέτες και να καταγράψει τις όποιες επιδράσεις, με τεράστια οφέλη για τον σχεδιασμό διεργασιών (Βλάχος, 2005).

Η απόδοση των δεξαμενών επαφής εξαρτάται τόσο από το πεδίο ροής όσο και από τις χημικές ή βιολογικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στη δεξαμενή. Το πεδίο ροής ελέγχει την μεταφορά του απολυμαντικού μέσου (χλωρίου), ενώ η κίνηση και διασπορά του απολυμαντικού προκαλεί την απενεργοποίηση των βακτηρίων. Συνεπώς, η μοντελοποίηση των διεργασιών απολύμανσης σε δεξαμενές επαφής, πρέπει να απαρτίζεται από ένα σετ εξισώσεων, η λύση των οποίων παρέχει πληροφορίες για το χρονικά μεταβαλλόμενο πεδίο ροής, το πεδίο μεταφοράς του απολυμαντικού και το βαθμό απενεργοποίησης των βακτηρίων. Η υπολογιστική δομή ενός μοντέλου περιγραφής της διεργασίας της απολύμανσης δίνεται στο Σχήμα 5.1 (Wang & Falconer, 1998a).

Για την μοντελοποίηση της μεταφοράς του απολυμαντικού μέσου και της μεταφοράς – απενεργοποίησης των βακτηρίων, χρησιμοποιούνται εξισώσεις μεταφοράς σε συνδυασμό με κινητικές εξισώσεις.



Σχήμα 5.1: Υπολογιστική δομή μοντέλου απολύμανσης (Wang & Falconer, 1998a)

Στη συνέχεια του παρόντος κεφαλαίου, αναλύονται οι βασικές θεμελιώδεις εξισώσεις που διέπουν τη ροή των ρευστών και γίνεται εισαγωγή στις βασικές έννοιες της τυρβώδους ροής με παρουσίαση των χρονικά μέσων εξισώσεων Navier – Stokes (RANS). Κατόπιν αναλύονται τα κυριότερα μοντέλα της τύρβης με έμφαση στο k-ε μοντέλο, το οποίο έχει επιτυχώς χρησιμοποιηθεί σε εργασίες προσομοίωσης δεξαμενών χλωρίωσης.

Επιπλέον, αναλύονται και διαχωρίζονται οι έννοιες διάχυσης και διασποράς, με σκοπό την εξαγωγή της εξίσωσης μεταφοράς του χλωρίου και της εξίσωσης μεταφοράς – απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Επιπλέον, παρουσιάζονται εκτενώς τα κυριότερα μοντέλα που έχουν αναπτυχθεί για την περιγραφή της κινητικής αδρανοποίησης των παθογόνων μικροοργανισμών που εμπεριέχονται στα αστικά λύματα, καθώς και των μοντέλων που έχουν προταθεί για την περιγραφή της κινητικής απομείωσης της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου (χλώριο). Τα τελευταία χρησιμοποιήθηκαν για την εξαγωγή των εξισώσεων μεταφοράς (συναγωγής) – διάχυσης του χλωρίου στη δεξαμενή χλωρίωσης και της εξίσωσης μεταφοράς (συναγωγής) – διάχυσης των μικροοργανισμών.

5.2 Βασικές εξισώσεις της ροής των ρευστών

5.2.1 Εξίσωση συνέχειας και ορμής

Σε ένα στοιχείο ρευστού (ή σε οποιοδήποτε σύστημα που έχει όρια) η εξίσωση του ισοζυγίου μάζας είναι η εξής:

$$(Ρυθμός ροής εισερχόμενης μάζας) - (Ρυθμός ροής εξερχόμενης μάζας) = (Ρυθμός συσσώρευσης μάζας)$$

Η διαφορική εξίσωση διατήρησης της μάζας σε ένα ρευστό, που είναι γνωστή ως **εξίσωση συνέχειας**, δίνεται από την εξίσωση (McCabe et al., 2002):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} = -\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (5.1)$$

ή ισοδύναμα

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\rho (\nabla \cdot \vec{V}) \quad (5.2)$$

Το δεύτερο μέλος συμβολίζει την απόκλιση (divergence) του διανύσματος της μαζικής ταχύτητας $\rho \mathbf{V}$. Η εξίσωση συνέχειας μπορεί να δοθεί και με την σχέση (5.2) χρησιμοποιώντας την ποσότητα $D\rho/Dt$, που είναι ο ρυθμός μεταβολής της πυκνότητας, που θα έβλεπε ένας παρατηρητής που θα κινούνταν στην κατεύθυνση του ρευστού, μετά το σημείο ελέγχου, με την ταχύτητα του ρευστού. Πολλές φορές σε προβλήματα της μηχανικής το ρευστό είναι σχεδόν **ασυμπίεστο** και η πυκνότητά του ρ μπορεί να θεωρηθεί σταθερή χωρίς σημαντικό σφάλμα. Στην περίπτωση αυτή ισχύει $D\rho/Dt = 0$ και η εξίσωση συνέχειας γράφεται:

$$\nabla \cdot \vec{V} = \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = 0 \quad (5.3)$$

Η βασική αρχή του ισοζυγίου ορμής είναι:

$$\begin{aligned} (\text{Ρυθμός συσσώρευσης ορμής}) &= (\text{Ρυθμός εισερχόμενης ορμής}) - (\text{Ρυθμός εξερχόμενης ορμής}) \\ &+ (\text{Άθροισμα των δυνάμεων που δρουν στο σύστημα}) \end{aligned}$$

Η εξίσωση κίνησης που προκύπτει σε διανυσματική μορφή (τρεις συνιστώσες x,y,z), περιγράφεται από την εξίσωση (McCabe et al., 2002):

$$\rho \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = -\nabla P - [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] + \rho \vec{g} \quad (5.4)$$

Η τάση σε οποιοδήποτε σημείο εξαρτάται από τις διαβαθμίσεις της ταχύτητας και από τις ρεολογικές ιδιότητες του ρευστού. Για παράδειγμα, αναφέρονται για νευτωνικά υγρά οι συνιστώσες του διανύσματος της τάσης στην x-κατεύθυνση και εντελώς ανάλογα προκύπτουν και για τις άλλες δύο κατευθύνσεις.

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= -2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa \right) (\nabla \cdot \vec{V}) \\ \tau_{xy} &= \tau_{yx} = -\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \nabla \cdot \vec{V} &= \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \end{aligned} \quad (5.5)$$

όπου κ είναι το ιξώδες του κύριου όγκου. Υπάρχει μεγάλη αβεβαιότητα σχετικά με την τιμή του κ. Για μονοατομικά αέρια είναι ίσο με μηδέν και έχει γενικά μικρή σημασία για τα πυκνά αέρια και υγρά.

Με την αντικατάσταση των εξισώσεων (5.5) στην εξίσωση (5.4) προκύπτουν οι γενικές εξισώσεις κίνησης ενός νευτωνικού ρευστού με μεταβαλλόμενη πυκνότητα και μεταβαλλόμενο ιξώδες, στις τρεις κατευθύνσεις x,y,z. Ωστόσο, στις περισσότερες εφαρμογές χρησιμοποιούνται πιο απλές μορφές. Οι εξισώσεις κίνησης για ένα υγρό με σταθερή πυκνότητα και σταθερό ιξώδες είναι γνωστές ως εξισώσεις Navier-Stokes και εκφρασμένες σε ορούς ταχύτητας δίνονται, για καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων, στον πίνακα που ακολουθεί:

Πίνακας 5.1: Εξισώσεις Navier - Stokes

Για (ρ,μ = ct.)	ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ NAVIER – STOKES
Διανυσματική μορφή	$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{V} + \rho \vec{g}$ <p>ή ισοδύναμα (5.6)</p> $\rho \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} \right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{V} + \rho \vec{g}$
x-κατεύθυνση	$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho g_x$
y-κατεύθυνση	$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho g_y$
z-κατεύθυνση	$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho g_z$
<u>Ολοκληρωμένη διατύπωση.</u> Συνολικά τέσσερις εξισώσεις, με τέσσερις αγνώστους (u,v,w,P). Αδυναμία επίλυσης είτε στατιστικά, είτε υπολογιστικά.	

5.2.2. Βασικές έννοιες τυρβώδους ροής

Ως γνωστόν υπάρχουν δύο είδη ιξώδους ροής, η στρωτή και η τυρβώδης που διαφέρουν μεταξύ τους ως προς την εσωτερική δομή. Στη στρωτή ροή, το ρευστό κινείται ομαλώς και κατά στρώματα, χωρίς σωματίδια ρευστού ενός στρώματος να μεταφέρονται στο αμέσως γειτονικό του. Η επικοινωνία των στρωμάτων αυτών γίνεται μόνο σε μοριακό επίπεδο. Στην τυρβώδη ροή από την άλλη, τα σωματίδια του ρευστού κινούνται σε ακανόνιστες τροχιές προς όλες τις διευθύνσεις κατά εντελώς τυχαίο τρόπο. Η κίνηση αυτή

των σωματιδίων μοιάζει σε μεγάλο βαθμό με τη θερμική κίνηση των μορίων. Έτσι, κατά την τυρβώδη ροή συμβαίνει εκτός από μοριακή και μακροσκοπική ανάμιξη των γειτονικών στρωμάτων του ρευστού (Παπαϊωάννου, 2002).

Η μετατροπή της ιξώδους ροής σε τυρβώδη οφείλεται στην ενίσχυση ορισμένων διαταραχών, οι οποίες πάντοτε υπάρχουν σε στρωτή ροή. Η βασική παράμετρος που χαρακτηρίζει το είδος μιας ροής είναι ο αριθμός Reynolds Re , που ορίζεται από τη γενική εξίσωση:

$$Re = \frac{u_0 l_0}{\nu} \quad (5.7)$$

όπου, ν το κινηματικό ιξώδες του ρευστού, u_0 κάποια ταχύτητα αναφοράς και l_0 ένα χαρακτηριστικό μήκος που εξαρτάται από τη γεωμετρία του εξεταζόμενου προβλήματος.

Από φυσική άποψη, ο αριθμός Reynolds παριστάνει το λόγο των δυνάμεων αδράνειας προς τις ιξώδεις δυνάμεις που δρουν πάνω στο ρευστό:

$$Re = \frac{\text{Δυνάμεις αδράνειας}}{\text{Ιξώδεις δυνάμεις}}$$

Τα χαρακτηριστικά της τύρβης μπορούν να συνοψιστούν στα ακόλουθα (Clercq, 2003):

- **Αταξία (irregularity)** : Το πρώτο κύριο χαρακτηριστικό της τύρβης αποτελεί η ακανόνιστη κίνηση. Συνεπώς, απαιτούνται στατιστικές τεχνικές για την περιγραφή αυτού του είδους των ροών.
- **Διαχυτότητα:** Μια άλλη σημαντική παράμετρος της τύρβης είναι η διαχυτότητα, η οποία προκαλεί ταχεία ανάμιξη και αυξημένους ρυθμούς ορμής, θερμότητας και μεταφοράς μάζας.
- **Μεγάλοι αριθμοί Reynolds:** Είναι επακόλουθο της αστάθειας των στρωτών ροών. Η αταξία της ιξώδους διάχυσης και η μη – γραμμικότητα του αδρανειακού όρου, κάνει τις εξισώσεις Navier-Stokes σχεδόν δυσεπίλυτες.
- **Διακύμανση της στροβιλότητας σε τρεις διαστάσεις:** Η τυχαία περιστροφή ή οι διακυμάνσεις της στροβιλότητας, που χαρακτηρίζουν την τύρβη, δεν θα μπορούσαν να διατηρηθούν, εάν οι διακυμάνσεις της στροβιλότητας ήσαν διδιάστατες, καθώς

ένας σημαντικός μηχανισμός διατήρησης της στροβιλότητας, γνωστός ως έκταση δίνης (vortex stretching), δεν εμφανίζεται στις διδιάστατες ροές.

- **Σκέδαση:** Οι ιξώδεις τάσεις διάτμησης (viscous shear stresses) προκαλούν αλλοίωση της μορφής του σχήματος, αυξάνοντας έτσι την εσωτερική ενέργεια του ρευστού, για λογαριασμό της κινητικής ενέργειας της τύρβης. Έτσι, η τύρβη απαιτεί μια συνεχή παροχή ενέργειας, για να συμψηφίσει τις απώλειες από το ιξώδες.
- **Συνέχεια (continuum):** Η τύρβη είναι ένα συνεχές και ομογενές φαινόμενο, που διέπεται από τις εξισώσεις της μηχανικής των ρευστών. Ακόμη και οι μικρότερες κλίμακες που συναντώνται στην τυρβώδη ροή είναι πολύ μεγαλύτερες από οποιαδήποτε μοριακού μήκους κλίμακα.

Ανακεφαλαιώνοντας, το κύριο χαρακτηριστικό γνώρισμα της τυρβώδους ροής είναι ότι η ταχύτητα και η πίεση, σε τυχόν σημείο του πεδίου ροής, παρουσιάζουν συνεχείς, ακανόνιστες, μεγάλης συχνότητας διακυμάνσεις. Η ακανόνιστη και τυχαία διακύμανση των ιδιοτήτων του ρευστού καθιστά αδύνατη την αναλυτική έκφραση του πεδίου τυρβώδους ροής ως συνάρτηση του χρόνου και του χώρου. Είναι όμως δυνατόν, η τυρβώδης κίνηση των ρευστών να περιγραφεί κατά τρόπο στατιστικό. Έτσι, ακολουθώντας τον Reynolds, δεχόμαστε ότι η στιγμιαία ταχύτητα μπορεί να θεωρηθεί ως το άθροισμα δύο συνιστωσών, από τις οποίες, η πρώτη αναφέρεται στη μέση κίνηση και η δεύτερη στη διακυμαινόμενη κίνηση της τύρβης. Για παράδειγμα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.1 η στιγμιαία τοπική ταχύτητα u του ρευστού, μπορεί να θεωρηθεί ως άθροισμα της μέσης χρονικής τιμής \bar{u} και της στιγμιαίας διακύμανσης u' περί την αντίστοιχη μέση τιμή, δηλαδή $u = \bar{u} + u'$, όπου:

$$\bar{u} = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} u dt, \text{ με περίοδο ολοκλήρωσης } T, \text{ πολύ μεγαλύτερο από τη σχετική περίοδο των}$$

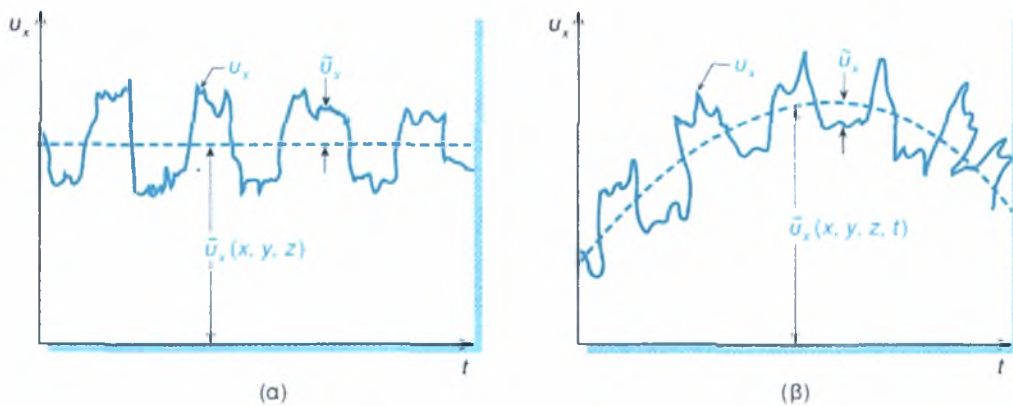
διακυμάνσεων. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση συνέχειας, τις ταχύτητες και την πίεση, προκύπτει μια όμοια έκφραση, με τη μόνη διαφορά ότι τώρα εμφανίζονται οι μέσες χρονικά μεταβλητές (βλ. Πίνακα 5.2) (Παπαϊωάννου, 2002).

Έχει διαπιστωθεί πειραματικά, ότι οι αντιστάσεις που αναπτύσσονται κατά την ιξώδη ροή ρευστών αυξάνονται σημαντικά όταν η ροή μετατρέπεται από στρωτή σε τυρβώδη. Για να είναι δυνατόν αυτό, στην τυρβώδη ροή, πρέπει να αναπτύσσονται εκτός από τις τάσεις που οφείλονται στη μοριακή κίνηση του ρευστού και τάσεις που οφείλονται στην τυρβώδη κίνηση των σωματιδίων του. Οι τάσεις αυτές είναι γνωστές ως τυρβώδεις τάσεις (ή

φαινομενικές τάσεις ή τάσεις Reynolds). Η ποσοτική έκφραση των τυρβωδών τάσεων δίνεται από τη σχέση:

$$\overline{\tau}^{(t)} = -\rho \overline{u' u'} \quad (5.8)$$

όπου $\overline{\tau}^{(t)}$, το δυαδικό της τυρβώδης τάσεως (εννέα καρτεσιανές συνιστώσες).



Σχήμα 5.2: Τυπική μεταβολή της στιγμιαίας τοπικής ταχύτητας u του ρευστού με το χρόνο : (α) για μόνιμη τυρβώδη ροή και (β) για μη μόνιμη τυρβώδη ροή (Παπαϊωάννου, 2002)

Η μαθηματική ωστόσο έκφραση αυτή των τυρβωδών τάσεων δεν προσφέρεται για τη μελέτη της τυρβώδους ροής των ρευστών, διότι οι όροι των διακυμάνσεων που εμπεριέχονται σε αυτές δεν μπορούν να μετρηθούν παρά μόνο σε λίγες περιπτώσεις τυρβώδους ροής. Για το λόγο αυτό, έχουν γίνει πολλές προσπάθειες για τη συσχέτιση των τυρβωδών τάσεων με χαρακτηριστικά μεγέθη της μέσης ροής, με κυριότερες θεωρίες αυτές των *Boussinesq*, του μήκους ανάμιξης και της ομοιότητας της τύρβης (Παπαϊωάννου, 2002).

Η διαφορική εξίσωση των Navier-Stokes (5.6) ισχύει τόσο για στρωτή όσο και για τυρβώδη ροή, αλλά για τις στιγμιαίες ιδιότητες. Έτσι, αν στις σχέσεις του πίνακα 5.1 αντικατασταθούν οι στιγμιαίες τιμές των μεταβλητών, με το άθροισμα της μέσης χρονικής τιμής και της στιγμιαίας διακύμανσης περί την αντίστοιχη μέση τιμή, προκύπτουν οι **χρονικά μέσες εξισώσεις Navier – Stokes** γνωστές ως Reynolds – Averaged Navier – Stokes equations (RANS), οι οποίες περιγράφονται στον Πίνακα 5.2.

Πίνακας 5.2: Εξισώσεις τινρβόδους ροής

	ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΤΥΡΒΗΣ
ΕΞΙΣΩΣΗ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ	$\nabla \cdot \vec{\bar{V}} = \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) = 0 \text{ και } \nabla \cdot \vec{\bar{V}'} = \left(\frac{\partial \bar{u}'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}'}{\partial z} \right) = 0$ <div>(5.9)</div>
RANS	
Διανυσματική μορφή	$\rho \frac{D\vec{\bar{V}}}{Dt} = -\nabla \bar{P} + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \vec{\bar{\tau}}^{(0)}$ <div>ή ισοδύναμα</div> <div>(5.10)</div> $\rho \left(\frac{\partial \vec{\bar{V}}}{\partial t} + \vec{\bar{V}} \cdot \nabla \vec{\bar{V}} \right) = -\nabla \bar{P} + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \vec{\bar{\tau}}^{(t)} + \nabla \cdot \vec{\bar{\tau}}^{(v)}$
x-ορμή	$\frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} + \rho \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x} + \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right)$ $+ \rho g_x + \left[\frac{\partial(-\rho \bar{u}' \bar{u}')}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \bar{v}' \bar{u}')}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \bar{w}' \bar{u}')}{\partial z} \right]$
y-ορμή	$\frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} + \rho \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial y} + \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right)$ $+ \rho g_y + \left[\frac{\partial(-\rho \bar{u}' \bar{v}')}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \bar{v}' \bar{v}')}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \bar{w}' \bar{v}')}{\partial z} \right]$
z-ορμή	$\frac{\partial(\rho \bar{w})}{\partial t} + \rho \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial z} + \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right)$ $+ \rho g_z + \left[\frac{\partial(-\rho \bar{u}' \bar{w}')}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \bar{v}' \bar{w}')}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \bar{w}' \bar{w}')}{\partial z} \right]$
<p>Μη ολοκληρωμένη διατύπωση. Εισάγεται ένας ακόμη άγνωστος $\bar{\tau}_{ij}^{(t)} = -\overline{\rho u'_i u'_j}$. Αυτό είναι γνωστό ως πρόβλημα ολοκλήρωσης της τίνρβης (“closure problem”). Μια λύση είναι πιθανή μετά την μοντελοποίηση των τάσεων Reynolds.</p>	
RANS	<p>Υπόθεση: $\bar{\tau}_{ij}^{(t)} = -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ (π.χ. $-\overline{\rho u' v'} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial y}$)</p>
x-ορμή	$\frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} + \rho \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x} + \rho g_x +$ $+ \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right] \right\}$

y-ορμή	$\frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} + \rho \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial y} + \rho g_y +$ $+ \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right] \right\}$
z-ορμή	$\frac{\partial(\rho \bar{w})}{\partial t} + \rho \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial z} + \rho g_z +$ $+ \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right] \right\}$

5.3. Παρουσίαση των κυριότερων μοντέλων τύρβης

5.3.1. Κατηγοριοποίηση μοντέλων τύρβης

Οι διεργασίες μεταφοράς που σχετίζονται με τις ροές πραγματικών ρευστών, περιγράφονται όπως είδαμε από ένα γκρουπ μη-γραμμικών μερικών διαφορικών εξισώσεων (Partial Differential Equations - PDE's). Ακόμη και οι απλές στρωτές ροές, απαιτούν ανώτερα μαθηματικά, για την αναλυτική τους έκφραση, ενώ οι πιο σύνθετες ροές είναι δισεπίλυτες ακόμη και με τις πλέον ισχυρές αναλυτικές σημερινές μεθόδους.

Όπως αναφέραμε στη προηγούμενη παράγραφο, η επίλυση του προβλήματος ολοκλήρωσης της τύρβης, απαιτεί ένα μοντέλο για τις τάσεις Reynolds. Στον πίνακα που ακολουθεί δίνεται μια κατηγοριοποίηση των κυριότερων μοντέλων της τύρβης με βάση το βαθμό πολυπλοκότητάς τους.

Πίνακας 5.3 : Κατηγοριοποίηση μοντέλων τύρβης (Versteeg & Malalasekera, 1995) & (Βλάχος, 2005)

Α. Κλασικά μοντέλα (Βασισμένα στις χρονικά μέσες εξισώσεις Reynolds)	
1. Μηδενικής εξίσωσης μοντέλο – μοντέλο μήκους ανάμειξης. Περιγραφή από αλγεβρικές σχέσεις. Δεν επιλύεται καμία μερική διαφορική εξίσωση, ούτε για την κλίμακα ταχύτητας, αλλά ούτε και για την κλίμακα μήκους της τυρβώδους κίνησης.	<u>Πλεονεκτήματα:</u> <ul style="list-style-type: none">Εύκολο στη χρήση και φθινό από άποψη απαιτούμενων υπολογιστικών πόρων.Καλή πρόβλεψη σε λεπτά στρώματα δυνάμεων συνοχής: jet, wakes (ολκούς) και οριακά στρώματα.Επιβεβαιωμένο μοντέλο.
	<u>Μειονεκτήματα:</u> <ul style="list-style-type: none">Εντελώς ανίκανο για την περιγραφή ροών με αποκόλληση ή ανακυκλοφορία.Υπολογίζει μόνο τις μέσες ιδιότητες της ροής και τις τυρβώδεις διατμητικές τάσεις.

<p>2. Μοντέλο μιας εξίσωσης. Παράλληλα με τις εξισώσεις της μέσης κίνησης, επιλύεται μια μερική διαφορική εξίσωση, για μια κλίμακα της τύρβης (κλίμακα ταχύτητας).</p>	<p><u>Πλεονεκτήματα:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Αποτελεσματικό για παράλληλες ή σχεδόν παράλληλες ροές. <p><u>Μειονεκτήματα:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Δεν είναι ικανοποιητικό για περιγραφή επιταχυνόμενων ή επιβραδυνόμενων ροών οριακών στρωμάτων με υψηλά gradient πίεσης. ○ Δεν είναι αποτελεσματικό για μη παράλληλες ροές (ροές με ανακυκλοφορία)
<p>3. Μοντέλο δύο εξισώσεων. Παράλληλα με τις εξισώσεις της μέσης κίνησης, επιλύονται δύο ακόμη μερικές διαφορικές εξισώσεις μεταφοράς, της κλίμακας μήκους και της κλίμακας ταχύτητας της τύρβης. Πλέον σύνηθες το k-ε μοντέλο.</p>	<p><u>Πλεονεκτήματα:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Το απλούστερο μοντέλο της τύρβης, το οποίο απαιτεί τον καθορισμό μόνο των αρχικών και/ή των οριακών συνθηκών ○ Το πλέον επιβεβαιωμένο μοντέλο. ○ Εφαρμογή σε πολλές βιομηχανικές εφαρμογές <p><u>Μειονεκτήματα:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Πιο σύνθετο στην εφαρμογή του από το μοντέλο μήκους ανάμιξης (επιπλέον δύο εξισώσεις) ○ Αδυναμία ή μικρή απόδοση σε σημαντικές περιπτώσεις, όπως : <ul style="list-style-type: none"> - σε απεριόριστες ροές - σε ροές με μεγάλες επιπρόσθετες διατμητικές τάσεις (π.χ. καμπύλα οριακά στρώματα, στροβιλώδης ροή) - σε περιστρεφόμενες ροές - σε πλήρως αναπτυγμένες ροές σε αγωγούς μη κυκλικής διατομής
<p>4. Αλγεβρικό μοντέλο τάσεως. Επίλυση όλων των εξισώσεων μεταφοράς των τάσεων Reynolds, παράλληλα με τις εξισώσεις μέσης ροής.</p>	<p><u>Πλεονεκτήματα:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Απαιτεί τον καθορισμό μόνο των αρχικών και/ή των οριακών συνθηκών ○ Εξαιρετικά ακριβής υπολογισμός των ιδιοτήτων της μέσης ροής και όλων των τάσεων Reynolds, για πολλές απλές και πολλές σύνθετες ροές, συμπεριλαμβανομένων των jet, των ασύμμετρων καναλιών και των ροών σε μη κυκλικούς αγωγούς και καμπύλες ροές. <p><u>Μειονεκτήματα:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Εξαιρετικά υψηλό υπολογιστικό κόστος (επιπλέον 7 εξισώσεις) ○ Λιγότερο επιβεβαιωμένο σε σχέση με τα προαναφερόμενα μοντέλα ○ Εμφανίζεται το ίδιο ανεπαρκές με το k-ε μοντέλο σε ορισμένες ροές (π.χ. αξονοσυμμετρικά jet, απεριόριστες ανακυκλοφορούμενες ροές)
<p>B. Προσομοίωση μεγάλων δινών (large eddy simulation) – (Βασισμένο σε space-filtered εξισώσεις)</p>	

Τα **κλασικά μοντέλα**, χρησιμοποιούν τις εξισώσεις Reynolds δημιουργώντας έτσι τη βάση των υπολογισμών της τύρβης, σε διαθέσιμους εμπορικούς κώδικες υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Οι **προσομοιώσεις των μεγάλων δινών**, είναι γενικά μοντέλα, όπου οι χρονικά εξαρτώμενες εξισώσεις της ροής, επιλύονται για τη μέση ροή και τις μεγάλες δίνες και για τα σημεία όπου οι μικρότερες δίνες δύναται να μοντελοποιηθούν. Οι μεγαλύτερες δίνες αλληλεπιδρούν ισχυρά με τη μέση ροή και εμπεριέχουν την περισσότερη ενέργεια, οπότε η προσέγγιση αυτή οδηγεί σε μια καλή μοντελοποίηση των κύριων επιδράσεων της τύρβης. Ωστόσο, οι προσομοιώσεις μεγάλης κλίμακας εξακολουθούν να βρίσκονται σε ερευνητικό στάδιο και οι υπολογισμοί κοστίζουν εξαιρετικά και δεν θα αναλυθούν περαιτέρω στο παρόν σύγγραμμα. (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Δυστυχώς, δεν υπάρχει κανένα απλό μοντέλο που να είναι καθολικά αποδεκτό για όλα τα είδη των προβλημάτων. Η επιλογή του μοντέλου της τύρβης, που θα χρησιμοποιηθεί κάθε φορά, εξαρτάται από τη φυσική του προβλήματος, τον απαιτούμενο βαθμό ακρίβειας των υπολογισμών, τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους και το διαθέσιμο χρόνο για την πραγματοποίηση της προσομοίωσης. Σε κάθε περίπτωση η σωστή επιλογή προϋποθέτει την κατανόηση των δυνατοτήτων και των περιορισμών που παρουσιάζει κάθε μια από τις δυνατές επιλογές. (Fluent user's guide, 1998)

Στη συνέχεια γίνεται μια συνοπτική περιγραφή των κυριότερων μοντέλων κάθε κατηγορίας, με έμφαση στο k-ε μοντέλο της τύρβης, το οποίο θα εφαρμοστεί στην προσομοίωσης της ροής στη δεξαμενή χλωρίωσης.

5.3.2. Μοντέλο μηδενικής εξίσωσης

Μια πρώτη προσπάθεια για την μοντελοποίηση της τύρβης έγινε από τον Boussinesq (1877), ο οποίος θεώρησε ότι οι τυρβώδεις τάσεις μπορούν να εκφραστούν μαθηματικά όπως και οι αντίστοιχες ιξώδεις τάσεις (κατ' αναλογία προς το νόμο ιξώδους του Newton, $\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$). Ο Boussinesq υπέθεσε ότι το ιξώδες της τύρβης είναι σταθερό. Στην πραγματικότητα το ιξώδες της τύρβης ή ιξώδες δίνης $\mu^{(t)}$ μεταβάλλεται σημαντικά, όχι μόνο με τις συνθήκες ροής αλλά και από σημείο σε σημείο, για δεδομένη ροή. Επιπρόσθετα, το ιξώδες $\mu^{(t)}$, είναι πολύ μεγαλύτερο από το ιξώδες μ σε όλο το πεδίο ροής, εκτός από την περιοχή του ρευστού που βρίσκεται κοντά σε στερεά σώματα, όπου η τιμή του θεωρείται αμελητέα (Παπαϊωάννου, 2002).

Η πρώτη επιτυχημένη προσπάθεια συσχέτισης των τυρβωδών τάσεων με χαρακτηριστικά μεγέθη της μέσης ροής έγινε από τον Prandtl, ο οποίος ανέπτυξε τη *θεωρία του μήκους ανάμιξης*. Η θεωρία αυτή είναι παρόμοια με την κινητική θεωρία των αερίων. Σύμφωνα με την πρόταση του Prandtl, το ιξώδες της δίνης υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\nu_t = u_t l_m = l_m^2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right) \quad (5.11)$$

όπου l_m είναι το μήκος ανάμιξης, το οποίο είναι γενικά μια άγνωστη παράμετρος που εξαρτάται από τη θέση και τις συνθήκες ροής. Μπορεί όμως, για τις περισσότερες απλές ροές, να εκφραστεί με αλγεβρικές σχέσεις.

5.3.3. Μοντέλο μίας εξίσωσης

Για την βελτίωση των μοντέλων που περιγράφηκαν προηγουμένως, πρέπει να εισάγουμε την κινητική ενέργεια της τύρβης $K = \frac{1}{2} u_i u_i$ (5.12), η οποία αποτελεί την πλέον βασική τοπική παράμετρο που χαρακτηρίζει την τύρβη (Arpaci & Larsen, 1984). Πιο αναλυτικά, η κινητική ενέργεια της τύρβης είναι ενέργεια που αφαιρείται από την κύρια ροή κατά το σχηματισμό της τύρβης. Η ενέργεια αυτή, υπό την επίδραση των ιξωδών δυνάμεων, μετατρέπεται τελικά σε θερμική ενέργεια. Έτσι, από ενεργειακή άποψη, η κινητική ενέργεια της τύρβης θεωρείται σαν απώλεια ενέργειας (Παπαϊωάννου, 2002).

Σύμφωνα με την πρόταση των Prandtl και Kolmogorov, η κλίμακα της ταχύτητας της τυρβώδους κίνησης, σχετίζεται με τη μέση κινητική ενέργεια της τύρβης με τη σχέση $u_t \sim K^{1/2}$. Μια εξίσωση μεταφοράς για το k λύνεται μαζί με τις εξισώσεις της μέσης κίνησης. Στη συνέχεια το ιξώδες της τύρβης δίνεται από τη σχέση των Prandtl – Kolmogorov:

$$\mu_t = \text{const} \rho (k)^{1/2} l \quad (5.13)$$

5.3.4. Μοντέλα δύο εξισώσεων

Το ιξώδες της τύρβης μπορεί να προσδιορισθεί από τη σχέση των Prandtl – Kolmogorov, αφού πρώτα καθορισθούν οι κλίμακες ταχύτητας και μήκους. Η γενική ιδέα ενός δύο – εξισώσεων μοντέλου συνοψίζεται στα εξής:

- ✓ Καθορισμός ενός μεγέθους $z = k^m l^n$, όπου m,n σταθερές.
- ✓ Ακριβής εξίσωση μεταφοράς για το z.
- ✓ Έκφραση όλων των συσχετίσεων της τύρβης σε όρους γνωστών ποσοτήτων , π.χ.

$$-z'v' = const.(k)^{1/2} l \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)$$
- ✓ Καθορισμός του l από τα k και z, αφού υπολογιστούν οι αντίστοιχες διαφορικές εξισώσεις αυτών.

Το κυριότερο μοντέλο αυτής της κατηγορίας είναι το k-ε μοντέλο της τύρβης και επειδή θα χρησιμοποιηθεί στις προβλέψεις μας συζητείται εκτενώς στην συνέχεια.

Μοντέλο Τύρβης k-ε

A. Ροές με Υψηλούς Αριθμούς Reynolds

Σε ροές με υψηλούς αριθμούς Reynolds η εξίσωση μεταφοράς της κινητικής ενέργειας της τύρβης λαμβάνει την εξής μορφή:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho k}{\partial t}}_{\text{ρυθμός μεταβολής}} + \underbrace{\frac{\partial \rho u_j k}{\partial x_j}}_{\text{αδράνεια}} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho u_j' k'} + \overline{P' u_j'} \right)}_{\text{διάχυση}} - \underbrace{\overline{\rho u_i' u_j'} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{παραγωγή}} - \underbrace{\mu \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}_{\text{σκέδαση}} \quad (5.14)$$

όπου, ο πρώτος όρος αντιπροσωπεύει τον ρυθμό μεταβολής, ο δεύτερος την αδράνεια, ο τρίτος τη διάχυση, ο τέταρτος την παραγωγή και ο πέμπτος τη σκέδαση.

Οι όροι αυτοί μοντελοποιούνται ακολούθως:

ο Διάχυση:

Η διάχυση της ενέργειας και της πίεσης σχετίζονται με την κλίση (gradient) της μέσης κινητικής ενέργειας της τύρβης:

$$-\underbrace{(\overline{\rho u_j k' + P' u_j})}_{\text{διάχυση}} = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (5.15)$$

όπου, σ_k είναι ο αριθμός Prandtl για την κινητική ενέργεια της τύρβης.

ο Παραγωγή:

Οι τάσεις Reynolds προσομοιώνονται με την έννοια του τυρβώδους ιξώδους.

$$\underbrace{\overline{\rho u_i u_j}} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \quad (5.16)$$

ο Σκέδαση:

Οι όροι σκέδασης γίνονται:

$$\underbrace{\mu \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}}_{\text{σκέδαση}} = \rho \varepsilon \quad (5.17)$$

Έτσι, η εξίσωση μεταφοράς της κινητικής ενέργειας της τύρβης k , παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho k}{\partial t}}_{\text{ρυθμός μεταβολής}} + \underbrace{\frac{\partial \rho \overline{u_j k}}{\partial x_j}}_{\text{αδράνεια}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right)}_{\text{διάχυση}} + \underbrace{\mu_t \left[\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \right] \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}}_{\text{παραγωγή}} - \underbrace{\rho \varepsilon}_{\text{σκέδαση}} \quad (5.18)$$

Η εξίσωση μεταφοράς για τη μέση σκέδαση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας εξάγεται από ομάδα εξισώσεων του Harlow και είναι η παρακάτω:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t}}_{\text{ρυθμός μεταβολής}} + \underbrace{\frac{\partial \rho \overline{u_j \varepsilon}}{\partial x_j}}_{\text{αδράνεια}} &= -2\mu \underbrace{\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_l} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_l} + \frac{\partial \overline{u_l}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{u_l}}{\partial x_j} \right)}_{\text{παραγωγή}} - 2\mu \underbrace{\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{u_l}}{\partial x_l} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_l} \right)}_{\text{επίδραση τύρβης}} \\ &- \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho u_j \varepsilon} + 2\nu \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_l} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_l} \right)}_{\text{διάχυση}} - 2\mu \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \overline{u_i}}{\partial x_j \partial x_l} \right)^2}_{\text{σκέδαση}} \end{aligned} \quad (5.19)$$

όπου, ε είναι η στιγμιαία τιμή της σκέδασης της κινητικής ενέργειας της τύρβης.

Οι όροι της προηγούμενης εξίσωσης μοντελοποιούνται ακολούθως :

ο Παραγωγή:

Οι όροι της παραγωγής σχετίζονται με τις τάσεις Reynolds

$$c_1 \frac{\varepsilon}{\kappa} \overline{\rho u_i u_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (5.20)$$

ο Επίδραση και σκέδαση :

Οι όροι της επίδρασης και της σκέδασης της τύρβης μοντελοποιούνται μαζί

$$\rho \cdot c_2 \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (5.21)$$

ο Διάχυση:

Ο όρος της διάχυσης σχετίζεται με την βαθμίδα της σκέδασης

$$\rho \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \quad (5.22)$$

όπου, σ_ε είναι ο τυρβώδης αριθμός Prandtl για την τυρβώδη σκέδαση.

Έτσι, η εξίσωση μεταφοράς της σκέδασης της κινητικής ενέργειας της τύρβης, γίνεται :

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \overline{u_j \varepsilon}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + c_1 \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right) \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \rho c_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.23)$$

Το τυρβώδες ιξώδες μπορεί να εκφραστεί με την βοήθεια της διαστατικής ανάλυσης, ως εξής:

$$\mu_t = c_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.24)$$

Η εξίσωση μεταφοράς για μια βαθμωτή ιδιότητα Φ , μπορεί να εκφραστεί τώρα ως εξής:

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \overline{u_j \Phi}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + F_\Phi \quad (5.25)$$

όπου, σ_Φ είναι ο τυρβώδης αριθμός Prandtl/Schmidt για την βαθμωτή ιδιότητα Φ και ο F_Φ αποτελεί τον όρο παραγωγής / σκέδασης.

B. Ροές με Μικρούς Αριθμούς Reynolds

Οι ακόλουθοι όροι προστίθενται στη δεξιά πλευρά των εξισώσεων που αναφέρθηκαν παραπάνω, στην περίπτωση ροών με χαμηλούς αριθμούς Reynolds.

k – εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - 2\mu \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \right)^2 \quad (5.26)$$

ε – εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) - 2\mu \mu_i \left(\frac{\partial^2 \overline{u_i}}{\partial x_k \partial x_l} \right)^2 \quad (5.27)$$

Οι σταθερές του μοντέλου παίρνουν τις ακόλουθες τιμές:

Τιμές Σταθερών μοντέλου k – ε				
$C_u = 0,09$	$C_1 = 1,44$	$C_2 = 1,92$	$\sigma_k = 1,0$	$\sigma_\varepsilon = 1,3$

5.3.5. Μοντέλο τάσεων Reynolds

Είναι το πιο σύνθετο από τα κλασικά μοντέλα. Η πολυπλοκότητα που εμφανίζουν τα μοντέλα αυτά, δεν επιτρέπουν την εκτεταμένη τους χρήση και συνεπώς ένας περιορισμένος αριθμός εφαρμογών τους αναφέρεται στη βιβλιογραφία. Η πολυπλοκότητα γίνεται φανερή αν εκφράσουμε την εξίσωση μεταφοράς για τις τυρβώδεις τάσεις, σύμφωνα με την πρόταση του Rotta:

$$\underbrace{\frac{D \overline{\rho u_i' u_j'}}{Dt}}_I = - \underbrace{\left(\overline{\rho u_j' u_k'} \frac{\partial \overline{u_i'}}{\partial x_k} + \overline{\rho u_i' u_k'} \frac{\partial \overline{u_j'}}{\partial x_k} \right)}_{II} + \underbrace{P \left(\frac{\partial \overline{u_i'}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j'}}{\partial x_i} \right)}_{III} - \underbrace{2\mu \frac{\partial \overline{u_i'}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u_j'}}{\partial x_k}}_{IV} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho u_i' u_j' u_k'} - \frac{\partial \overline{\rho u_i' u_j'}}{\partial x_k} + P \left(\overline{u_i' \delta_{jk}} + \overline{u_j' \delta_{ik}} \right) \right)}_V \quad (5.28)$$

όπου οι όροι της εξίσωσης παριστάνουν:

I : Ρυθμός μεταβολής και μεταφορά με συναγωγή των τάσεων

II: παραγωγή (γένεση) από την μέση ροή

III : τανυστής πίεσης

IV: σκέδαση της κινητικής ενέργειας της τύρβης

V: διάχυση της τάσεως μέσω πλευρικής συναγωγής και gradient της πίεσης

Όπως αναμενόταν στην εξίσωση αυτή εμφανίζονται τριπλές συσχετίσεις. Αυτές σύμφωνα με τους Launder και Spalding δεν έχουν σημαντικό ενδιαφέρον στο σχεδιασμό. Στη συνέχεια ο χρήστης του μοντέλου, πρέπει να προσεγγίσει τους όρους διάχυσης, σκέδασης και του τανυστή της πίεσης, για να ‘κλείσει’ το σετ των εξισώσεων μεταφοράς.

5.4. Μοντελοποίηση αντιδραστήρων εμβολικής ροής

5.4.1. Εισαγωγή

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, οι περισσότερες χημικές αντιδράσεις ολοκληρώνονται επιτυχώς σε αντιδραστήρες εμβολικής ροής (τυρβώδους ροής) και ως εκ τούτου αποτελεί συνήθη τακτική οι δεξαμενές χλωρίωσης να σχεδιάζονται με τρόπο τέτοιο ώστε να προσεγγίζονται κατά το μέγιστο δυνατό οι συνθήκες αυτές. Ωστόσο, σε ένα πραγματικό σύστημα ροής, το ρευστό σπάνια κινείται με ιδανική εμβολική ροή, διότι υπάρχει συνήθως ένας βαθμός διαμήκης ανάμιξης, με αποτέλεσμα ένα τμήμα της ροής να διέρχεται από τη δεξαμενή σε μικρότερο χρόνο, ενώ ένα άλλο τμήμα της ροής να εμφανίζει κάποια χρονική υστέρηση (*Wang et al., 2003*).

Στην ενότητα αυτή γίνεται μια συνοπτική παρουσίαση της ιδανικής και της μη ιδανικής ροής σε αντιδραστήρες εμβολικής ροής και της μοντελοποίησης των υδραυλικών χαρακτηριστικών των μη ιδανικών αντιδραστήρων με τη βοήθεια της έννοιας της διασποράς, με σκοπό την εξοικείωση του αναγνώστη με τις βασικές έννοιες και συμβολισμούς που χρησιμοποιούνται στην ολοκληρωμένη αντιμετώπιση των προβλημάτων ροής και μεταφοράς στις δεξαμενές χλωρίωσης.

5.4.2. Μοντελοποίηση ιδανικής ροής

Στους αντιδραστήρες εμβολικής ροής, τα σωματίδια του ρευστού περνούν δια μέσω του αντιδραστήρα με αμελητέα ή καθόλου διαμήκη ανάμιξη και εξέρχονται από αυτόν με την ίδια αλληλουχία με την οποία εισέρχονται. Επιπλέον, τα σωματίδια διατηρούν την ταυτότητά τους και παραμένουν στον αντιδραστήρα για ένα χρόνο ίσο με το θεωρητικό χρόνο

παραμονής. Αυτού του είδους η ροή συναντάται συνήθως σε μεγάλες ανοικτές δεξαμενές με υψηλό λόγο μήκους / πλάτος στις οποίες η διασπορά είναι ελάχιστη ή απουσιάζει πλήρως.

5.4.3. Μοντελοποίηση μη- ιδανικής ροής

Εξαιτίας της λάθος εκτίμησης των υδραυλικών των αντιδραστήρων, πολλές από τις εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων που λειτουργούν σήμερα, δεν εμφανίζουν την υδραυλική απόδοση για την οποία σχεδιάστηκαν.

Ως μη ιδανική ορίζεται η ροή κατά την οποία ένα τμήμα αυτής, το οποίο εισέρχεται στον αντιδραστήρα σε μια δεδομένη χρονική στιγμή, φτάνει στην έξοδο πριν από την κύρια μάζα της ροής, που εισέρχεται στον αντιδραστήρα κατά την διάρκεια της ίδιας χρονικής περιόδου.

Τα υδραυλικά χαρακτηριστικά των μη ιδανικών αντιδραστήρων μπορούν να μοντελοποιηθούν αν ληφθεί υπόψη η διασπορά. Στο σημείο λοιπόν αυτό είναι κρίσιμο να γίνει μια σαφής διάκριση των όρων μοριακής διάχυσης, τυρβώδους διάχυσης και της διασποράς, όπως χρησιμοποιούνται οι όροι αυτοί στην ανάλυση των αντιδραστήρων επεξεργασίας λυμάτων.

Μοριακή Διάχυση

Υπό αδρανειακές συνθήκες ροής (απουσία ροής), η μεταφορά μάζας ενός υλικού πραγματοποιείται εξαιτίας της μοριακής διάχυσης.

Εντελώς ανάλογα ως προς τον νόμο του Newton για το ιξώδες και το νόμο του Fourier για τη θερμική αγωγιμότητα, η μεταφορά μάζας με μοριακή διάχυση, για την περίπτωση συστημάτων στη μόνιμη κατάσταση, μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει της κλίσης (gradient) της συγκέντρωσης, σύμφωνα με τη σχέση:

$$j = -D_m \frac{\partial C}{\partial x}$$

ή

$$\bar{j}_i = -\rho D_{im} \bar{\nabla} \left(\frac{C_i}{\rho} \right) \quad (5.29)$$

όπου:

j = ο ρυθμός μεταφορά μάζας (σε όρους συγκέντρωσης) ανά μονάδα επιφάνειας και ανά μονάδα χρόνου $ML^{-2}T^{-1}$

D_m = συντελεστής μοριακής διάχυσης στην x διεύθυνση, L^2T^{-1}

C = η συνιστώσα της συγκέντρωσης που μεταφέρεται, ML^{-3}

x = η απόσταση, L

Το μείον δηλώνει ότι η διάχυση γίνεται προς την κατεύθυνση που παρατηρείται μείωση της συγκέντρωσης. Η σχέση (5.29) είναι γνωστή ως πρώτος $1^{ος}$ Νόμος του Fick. (Μαρκόπουλος, 1997).

Τυρβώδης Διάχυση

Υπό τυρβώδεις συνθήκες (π.χ. ανάμιξη) χωρίς όμως ροή, η μεταφορά μάζας οφείλεται στις μικροκλίμακες της τύρβης και είναι γνωστή ως “διάχυση τύρβης ή διάχυση δινών”. Στην περίπτωση αυτή ο όρος D_m της εξίσωσης (5.29) αντικαθίσταται από τον όρο τυρβώδους διάχυσης D_e (Metcalf & Eddy, 2003).

Η τυρβώδης μεταφορά ενός βαθμωτού μεγέθους, θεωρείται ανάλογη του gradient της μέσης τιμής της μεταφερόμενης ποσότητας. Έτσι, ορίζεται η τυρβώδης διαχυτότητα σύμφωνα με τη σχέση:

$$-\overline{\rho u_i \phi'} = D_e \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_i} \quad (5.30)$$

Επειδή η τυρβώδης μεταφορά της ορμής, της θερμότητας ή της μάζας, συμβαίνουν εξαιτίας του ίδιου μηχανισμού – ανάμιξη δινών – μπορούμε χρησιμοποιώντας την αναλογία Reynolds να συσχετίσουμε το ιξώδες δίνης (τυρβώδες ιξώδες) με τη διαχυτότητα της τύρβης, μέσω της ακόλουθης απλής εξίσωσης:

$$D_e = \frac{\nu_t}{\sigma_t} \quad (5.31)$$

όπου, σ_t είναι ο αριθμός Prandtl για την περίπτωση μεταφοράς θερμότητας και ο αριθμός Schmidt για την περίπτωση μεταφοράς μάζας. Οι αριθμοί αυτοί παραμένουν γενικά σταθεροί κατά μήκος μιας ροής και από ροή σε ροή. Δυστυχώς σε σύνθετες ροές δεν συμβαίνει το ίδιο. Ωστόσο οι περισσότερες διαδικασίες υπολογιστικής ρευστομηχανικής δέχονται τιμές κοντά στη

μονάδα. Συγκεκριμένα ο Rodi (1980) πρότεινε τιμή $\sigma_t = 0,9$ για ροές κοντά σε τοιχώματα, $\sigma_t = 0,5$ για την περίπτωση jet και ανάμικτων στοιβάδων (mixing layers) και $\sigma_t = 0,7$ για την περίπτωση αξονοσυμμετρικών jet (Versteeg & Malalasekera, 1995) & (Stamou, 1991).

Διασπορά

Υπό τυρβώδεις συνθήκες ροής, η διαμήκης έγχυση ενός ιχνηθέτη προκαλείται με τη διασπορά και ο όρος D_m της εξίσωσης (5.29) αντικαθίσταται από τον συντελεστή διασποράς D . Ο συντελεστής αυτός περιλαμβάνει τις επιδράσεις της διασποράς που προκαλούνται: (i) με συναγωγή (π.χ. μεταφορά που οφείλεται στις διαφορετικές ταχύτητες του ρευστού), (ii) από τις τυρβώδεις δίνες (π.χ. τυρβώδης διάχυση) και (iii) με μοριακή διάχυση (Perry's, 1999).

Ενώ η ποσότητα της μοριακής διάχυσης εξαρτάται κυρίως από τις φυσικοχημικές ιδιότητες του ρευστού, η τυρβώδης διάχυση ή διάχυση δινών και η διασπορά, εξαρτώνται κυρίως από το καθεστώς ροής. Ωστόσο, υπενθυμίζουμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις η κινούσα δύναμη για τη μεταφορά της μάζας είναι η κλίση της πίεσης. Γενικά, η ακόλουθη σχέση ισχύει όσον αφορά την σύγκριση των αριθμητικών τιμών των προαναφερόμενων μεγεθών, ενώ στον Πίνακα 5.4. δίνονται οι τυπικές τιμές τους:

$$D \gg D_e \gg D_m$$

Πίνακας 5.4: Τυπικές τιμές συντελεστών μοριακής διάχυσης, τυρβώδους διάχυσης και διασποράς (Metcalf & Eddy, 2003)

Είδος	Σύμβολο	Τυπικές τιμές
Μοριακή διάχυση	D_m	$10^{-8} - 10^{-4}$
Τυρβώδης διάχυση ή διάχυση δινών	D_e	$10^{-4} - 10^{-2}$
Διασπορά	D	$10^2 - 10^6$

Η εκτίμηση του συντελεστή αξονικής διασποράς D για υφιστάμενες εν λειτουργία εγκαταστάσεις πραγματοποιείται πειραματικά με τη χρήση ιχνηθετών. Ωστόσο, επειδή οι εγκαταστάσεις επεξεργασίας αστικών λυμάτων κάνουν χρήση μεγάλων δεξαμενών, η διεξαγωγή πειραματικών αναλύσεων είναι δύσκολη και εξαιρετικά δαπανηρή από άποψη χρημάτων και χρόνου και συχνά έρχεται απλά να επιβεβαιώσει το αποτέλεσμα. Για να ληφθεί υπόψη η αξονική διασπορά και στη φάση του σχεδιασμού έχουν αναπτυχθεί διάφορα βαθμωτά μοντέλα καθώς και ποικίλες εμπειρικές σχέσεις. Μια προσεγγιστική σχέση για το

συντελεστή διασποράς D , για το νερό, σε μεγάλους αριθμούς Reynolds, δίνεται από τη σχέση (Metcalf & Eddy, 2003) :

$$D = 1,01\nu N_R^{0,875} \quad (5.32)$$

όπου:

D = συντελεστής διασποράς (m^2/s)

ν = κινηματικό ιξώδες (m^2/s)

N_R = αριθμός Reynolds, αδιάστατος, με $N_R = \frac{4uR}{\nu}$

R = υδραυλική ακτίνα = εμβαδό / διαβρεχόμενη περίμετρος (m)

Οι συνήθεις αριθμοί Reynolds που συναντώνται στις ροές ανοικτών καναλιών στην επεξεργασία αστικών λυμάτων κυμαίνονται από 10^3 έως 10^4 . Οι αντίστοιχες τιμές για το D είναι $0,0004$ έως $0,003 m^2/s$ ή 4 έως $30 cm^2/s$.

5.5. Μοντέλα μεταφοράς συστατικού

5.5.1. Εξίσωση μεταφοράς ιχνηθέτη σε μία διάσταση

Αν αναφερθούμε στο Σχήμα 5.3 και λάβουμε υπόψη μας τον πρώτο νόμο του Fick (σχέση 5.29), τότε το ισοζύγιο μάζας σε μια διάσταση, για την μεταφορά ενός παραδοσιακού ιχνηθέτη, με συναγωγή και διασπορά, δίνεται από τη σχέση (Metcalf & Eddy, 2003):

$$(\text{Συσσώρευση}) = (\text{Εισροή}) - (\text{Εκροή}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} A \Delta x = \left(uAC - AD \frac{\Delta C}{\Delta x} \right)_x - \left(uAC - AD \frac{\Delta C}{\Delta x} \right)_{x+\Delta x} \quad (5.33)$$

όπου:

$\frac{\partial C}{\partial t}$ = αλλαγή της συγκέντρωσης με το χρόνο, $ML^{-3}T^{-1}$ (g/m^3s)

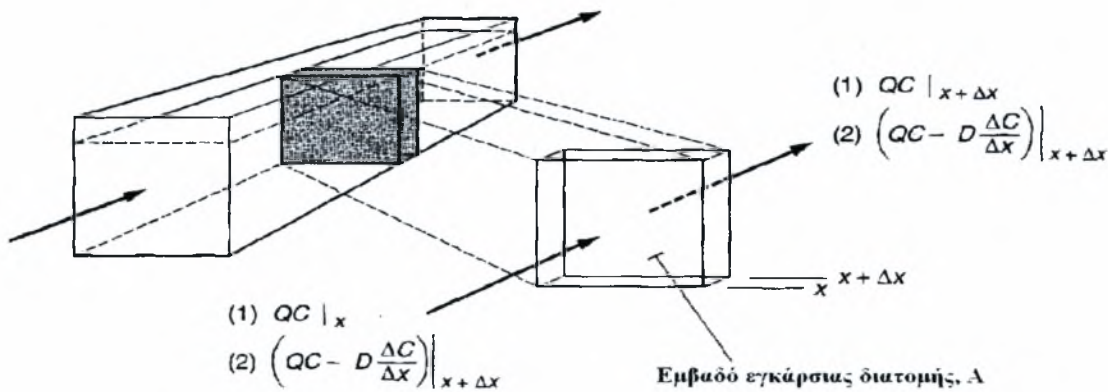
A = εμβαδό εγκάρσιας διατομής στην x - διεύθυνση, L^2 (m^2)

Δx = διαφορική απόσταση, L (m)

u = μέση ταχύτητα στη x διεύθυνση, LT^{-1} , (m/s)

C = συγκέντρωση συστατικού, ML^{-3} , (g/m^3)

D = συντελεστής αξονικής διασποράς, L^2T^{-1} , (m^2/s)



Σχήμα 5.3: Ανάλυση αντιδραστήρα εμβολικής ροής με : (1) μόνο συναγωγή και (2) συναγωγή και διασπορά

Ο όρος uAC της παραπάνω εξίσωσης παριστάνει τη μεταφορά μάζας λόγω συναγωγής και ο όρος $AD\Delta C/\Delta x$ αναπαριστά την μεταφορά λόγω της διασποράς. Αν πάρουμε το όριο της εξίσωσης (5.33) καθώς το Δx τείνει στο μηδέν παίρνουμε την ακόλουθη έκφραση:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.34)$$

Είναι εξαιρετικά δύσκολο να προσδιοριστεί ο ακριβής βαθμός αξονικής διασποράς. Για να μπορέσει να γίνει μια προσέγγιση του βαθμού διασποράς, χρησιμοποιείται ο ακόλουθος αδιάστατος αριθμός, που είναι γνωστός ως αριθμός διασποράς και ορίζεται από τη σχέση:

$$d = \frac{D}{uL} = \frac{Dt}{L^2} \quad (5.35)$$

όπου:

u = ταχύτητα του ρευστού, L^2T^{-1} , (m^2/s)

L = χαρακτηριστικό μήκος, L , (m)

T = χρόνος μεταφοράς, (L/u), T , (s)

Στην βιβλιογραφία συναντάται πιο συχνά ο αντίστροφος αριθμός της σχέσης (5.35), που είναι γνωστός ως αριθμός Peclet της διαμήκης διασποράς. Έτσι:

$$P_e = \frac{uL}{D} \quad (5.36)$$

Στην πραγματικότητα, ο αριθμός αυτός παριστάνει το λόγο της μεταφοράς μάζας με συναγωγή και διασπορά. Γίνεται λοιπόν εύκολα κατανοητό ότι για μεγάλους αριθμούς Pe , μεγαλύτερους της μονάδας, ο κύριος μηχανισμός μεταφοράς μάζας είναι η συναγωγή. Αντίθετα για τιμές του αριθμού $Pe < 1$, η διασπορά είναι ο επικρατέστερος μηχανισμός μεταφοράς μάζας.

Έχουν προταθεί διάφορες συσχετίσεις του αριθμού Peclet και ενδεικτικά για την περίπτωση αξονικής διασποράς σε άδειους αγωγούς ισχύει (Perry's, 1999):

$$\frac{1}{P_e} = \frac{1}{(R_e)(S_c)} + \frac{(R_e)(S_c)}{192}, \quad \text{για } 1 \leq R_e \leq 2000, \quad 0,2 \leq S_c \leq 1000$$

και

$$\frac{1}{P_e} = \frac{3(10^7)}{(R_e)^{2,1}} + \frac{1,35}{(R_e)^{0,125}}, \quad \text{για } R_e \geq 2000$$

(5.37)

Για πρακτικούς λόγους, οι παρακάτω τιμές του αριθμού διασποράς μπορούν να εφαρμοστούν, για την αποτίμηση του βαθμού της αξονικής διασποράς στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων.

Καθόλου διασπορά	$d = 0$ (ιδανική εμβολική ροή)
Χαμηλή διασπορά	$d = < 0,05$
Μέση διασπορά	$d = 0,05 \text{ έως } 0,25$
Υψηλή διασπορά	$d = > 0,25$
$d \rightarrow \infty$ (πλήρης ανάμιξη)	

Τυπικές τιμές του d για δεξαμενές επαφής – χλωρίωσης είναι 0,02 έως 0,004 cm^2/s .

5.5.2. Εξίσωση μεταφοράς συστατικού σε τρεις διαστάσεις

Τα προβλήματα διασποράς είναι γενικά τριών διαστάσεων, με τον συντελεστή διασποράς να ποικίλει με την κατεύθυνση και με το βαθμό της τύρβης. Έτσι, η μικροσκοπική εξίσωση συνέχειας (ή διατήρησης της μάζας) ενός συστατικού σε ένα ομογενές αντιδρών μίγμα, μπορεί να διατυπωθεί ως εξής (Κυπαρισσίδης, 1994):

$$\underbrace{\frac{\partial C_i}{\partial t}}_{\text{συσσώρευση}} + \underbrace{\vec{\nabla} \cdot (C_i \vec{u})}_{\text{συναγωγή}} + \underbrace{\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i}_{\text{μοριακή και / ή τυρβώδης διάχυση}} = \underbrace{R_i}_{\text{ολική ταχύτητα παραγωγής ή κατανάλωσης του } i} \quad (5.38)$$

Συσσώρευση:

Στην παραπάνω εξίσωση, το C_i συμβολίζει τη γραμμομοριακή συγκέντρωση του i συστατικού (Kmol/m^3). Συνεπώς, ο όρος $\frac{\partial C_i}{\partial t}$ εκφράζει το ρυθμό συσσώρευσης ή εξαφάνισης του συστατικού i .

Συναγωγή:

Ο όρος $\vec{\nabla} \cdot (C_i \vec{u})$ εκφράζει τη μεταφορά μάζας του συστατικού i λόγω συναγωγής. Ως $\vec{\nabla}$ συμβολίζεται ο τελεστής ανάδελτα και σε καρτεσιανές συντεταγμένες η κλίση ∇C , της βαθμωτής μεταβλητής C θα δίνεται ως εξής:

$$\nabla C = \frac{\partial C}{\partial x} \delta_x + \frac{\partial C}{\partial y} \delta_y + \frac{\partial C}{\partial z} \delta_z \quad (5.39)$$

όπου δ_k συμβολίζει το μοναδιαίο διάνυσμα στην k καρτεσιανή διεύθυνση.

Η απόκλιση, $\nabla \cdot \vec{u}$, της διανυσματικής μεταβλητής u σε καρτεσιανές συντεταγμένες θα ισούται ως γνωστόν με :

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (5.40)$$

Διάχυση:

Το διάνυσμα J χαρακτηρίζει το ρυθμό μεταφοράς μάζας του συστατικού i ανά μονάδα επιφάνειας, που οφείλεται σε μοριακή ή/ και τυρβώδη διάχυση. Για την στρωτή ροή ισχύει ο νόμος διάχυσης του Fick που περιγράφηκε προηγουμένως (σχέση 5.29).

Ταχύτητα παραγωγής ή κατανάλωσης:

Ως R_i συμβολίζεται η ολική ταχύτητα παραγωγής (κατανάλωσης) του συστατικού i και ορίζεται ως εξής:

$$R_i = \sum_{j=1}^R \nu_{ij} (r)_j \quad (5.41)$$

όπου: το R δηλώνει τον αριθμό των ανεξάρτητων χημικών αντιδράσεων, ν_{ij} είναι ο στοιχειομετρικός αριθμός του i συστατικού στην j αντίδραση και $(r)_j$ είναι η ταχύτητα της j αντίδρασης.

Προκειμένου να λάβουμε υπόψη μας εκτός της μοριακής διάχυσης (1^{ος} νόμος του Fick) και τη μεταφορά μάζας λόγω τυρβώδους διάχυσης, ο συντελεστής D_m αντικαθίσταται από το φαινομενικό συντελεστή D (συντελεστή διασποράς), ο οποίος είναι ίσος με το άθροισμα των συντελεστών μοριακής και τυρβώδους διάχυσης (Κυπαρισσίδης, 1994).

Στη συνέχεια περιγράφεται η εφαρμογή της εξίσωσης (5.38) (μεταφορά συστατικού με διάχυση και διασπορά) για την περιγραφή και μοντελοποίηση της μεταφοράς του απολυμαντικού μέσου (χλωρίου) και της μεταφοράς και απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, σε δεξαμενές επαφής χλωρίωσης.

Πιο αναλυτικά, **η μεταφορά του χλωρίου μοντελοποιείται από μια εξίσωση συναγωγής – διασποράς**, με την προσθήκη ενός όρου καταβόθρας, που παριστάνει την απομείωση του χλωρίου. Η κινητική απομείωσης του χλωρίου αν και συνηθίζεται να λαμβάνεται ως πρώτης τάξεως, ωστόσο έχουν προταθεί ποικίλες άλλες εκφράσεις που παρουσιάζονται αναλυτικά στην ενότητα 5.7 που ακολουθεί. Έτσι, η εξίσωση μεταφοράς για το χλώριο, σε δύο διαστάσεις, με τη θεώρηση ότι η απομείωση του χλωρίου ακολουθεί μια κινητική αντίδραση πρώτης τάξης και με αντικατάσταση του συντελεστή τυρβώδους διάχυσης από την εξίσωση (5.31), είναι:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u C) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v C) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(D_m + \frac{\mu_t}{\sigma_{ix}} \right) \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(D_m + \frac{\mu_t}{\sigma_{iy}} \right) \left(\frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] - \rho k C \end{aligned} \quad (5.42)$$

Ο *πρώτος όρος* αναπαριστά την μη μόνιμη συγκέντρωση του χλωρίου, ο *δεύτερος και τρίτος όρος* αναπαριστούν την συναγωγή του χλωρίου, ο *τέταρτος και πέμπτος όρος* την διάχυση του χλωρίου (συμπεριλαμβάνεται η μοριακή και η τυρβώδης διάχυση) και ο *τελευταίος όρος* την απομείωση του χλωρίου με το χρόνο (με την υπόθεση ότι αυτή ακολουθεί μια κινητική αντίδραση πρώτης τάξης).

Εντελώς ανάλογα, η **μεταφορά και απενεργοποίηση (καταστροφή) των μικροοργανισμών**, μοντελοποιείται με μια εξίσωση συναγωγής – διασποράς με ένα όρο καταβόθρας, που αναπαριστά το ρυθμό απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Στην εξίσωση που περιγράφεται στη συνέχεια, ο όρος αυτός αντικαθίσταται από τον νόμο των Chick-Watson, που έχει επικρατήσει για την περιγραφή των διεργασιών αδρανοποίησης των μικροοργανισμών, ωστόσο έχουν προταθεί σωρεία από μαθηματικά μοντέλα, για την περιγραφή της κινητικής απενεργοποίησης, με στόχο την καλύτερη προσέγγιση των πειραματικών δεδομένων (μη γραμμικά δεδομένα καμπύλης λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο), όπως αυτά περιγράφονται εκτενώς στην επόμενη ενότητα (ενότητα 5.6).

Έτσι, η εξίσωση μεταφοράς για τους μικροοργανισμούς, σε δύο διαστάσεις, με τη θεώρηση ότι η απενεργοποίηση αυτών ακολουθεί μια κινητική πρώτης τάξεως και με αντικατάσταση του συντελεστή τυρβώδους διάχυσης από την εξίσωση (5.31), είναι:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho N) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u N) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v N) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(D_m + \frac{\mu_t}{\sigma_{ix}} \right) \left(\frac{\partial N}{\partial x} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(D_m + \frac{\mu_t}{\sigma_{iy}} \right) \left(\frac{\partial N}{\partial y} \right) \right] - \rho k_N C^n N \end{aligned} \quad (5.43)$$

Ο *πρώτος όρος* αναπαριστά την μη μόνιμη συγκέντρωση των μικροοργανισμών, ο *δεύτερος και τρίτος όρος* αναπαριστούν την συναγωγή των οργανισμών, ο *τέταρτος και πέμπτος όρος* την διάχυση των οργανισμών (συμπεριλαμβάνεται η μοριακή και η τυρβώδης διάχυση) και ο *τελευταίος όρος* την απενεργοποίηση των οργανισμών με το χρόνο (με την υπόθεση ότι αυτή ακολουθεί μια κινητική πρώτης τάξης – νόμος των Chick/Watson).

Τόσο η εξίσωση μεταφοράς του χλωρίου όσο και η εξίσωση μεταφοράς και απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, μοντελοποιούνται λοιπόν με εξισώσεις συναγωγής – διασποράς, που για τις δύο διαστάσεις περιγράφηκαν αναλυτικά παραπάνω. Αμφότερες, οι εξισώσεις μεταφοράς του χλωρίου και των μικροοργανισμών, περιλαμβάνουν ένα όρο καταβόθρας που αναπαριστά την κινητική απομείωσης του χλωρίου και την κινητική

απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, αντίστοιχα. Για το λόγο αυτό στις ενότητες που ακολουθούν γίνεται μια βιβλιογραφική ανασκόπηση, παρουσιάζοντας τα κυριότερα μοντέλα περιγραφής των προαναφερόμενων κινητικών, αναλύοντας παράλληλα τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα που πηγάζουν από την χρήση του καθενός μοντέλου.

5.6. Μοντέλα κινητικής απενεργοποίησης των μικροοργανισμών

5.6.1. Ιστορική αναδρομή

Οι Kronig and Paul (1897) ανέφεραν ότι ο ρυθμός χημικής απολύμανσης των βακτηρίων εξαρτιόταν από τη συγκέντρωση του απολυμαντικού και τη θερμοκρασία του πειράματος. Στην συνέχεια, οι Madsen και Nyman (1907) και ο Chick (1908) πρότειναν ότι η απολύμανση είναι ανάλογη της διεργασίας της χημικής αντίδρασης. Αυτό έγινε γνωστό ως η *“μηχανιστική υπόθεση”* της απολύμανσης. Στη συνέχεια, έγινε μια νέα υπόθεση, γνωστή ως *“υπόθεση βιωσιμότητας”* σύμφωνα με την οποία υπάρχει μια κατανομή αντιστάσεων του μικροβιακού πληθυσμού προς τον χημικό παράγοντα απολυμάνσεως.

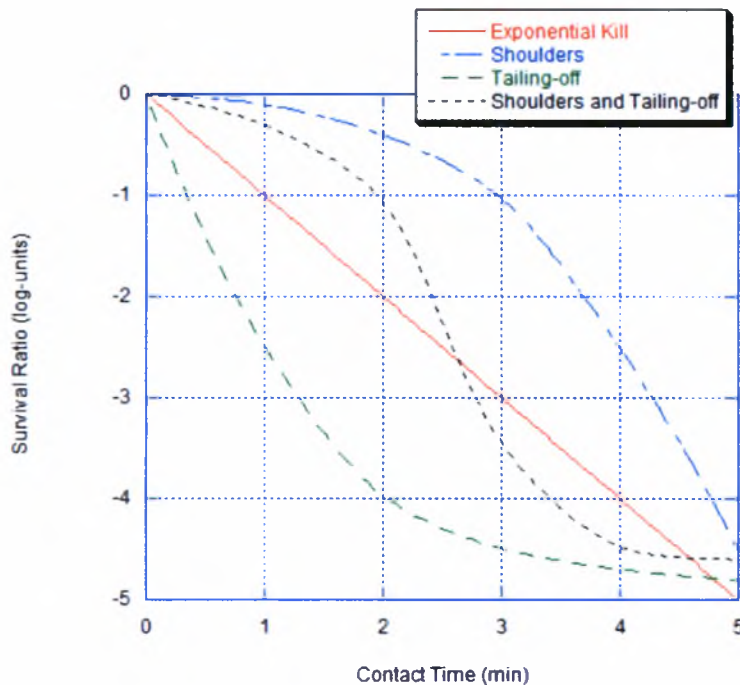
Η κύρια ιδιομορφία που παρουσίαζε η *“μηχανιστική υπόθεση”* ήταν η αδυναμία να λάβει υπόψη της το φαινόμενο της ουράς στις καμπύλες λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο t . Το μηχανιστικό μοντέλο των Chick –Watson, βασιζόταν στην κινητική μιας πρώτης τάξεως χημικής αντίδρασης. Η αδυναμία του μοντέλου αυτού να περιγράψει το φαινόμενο της ουράς, είχε ως αποτέλεσμα η παρουσία των αποκλίσεων από την ευθεία γραμμή (γραμμική) της καμπύλης λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο t , να αποδοθεί στις αντιστάσεις που παρουσιάζουν οι διάφοροι μικροοργανισμοί.

Από την προσεχτική έρευνα λοιπόν της βιβλιογραφίας, μπορεί κανείς να διαπιστώσει πως έχει προταθεί πλήθος μαθηματικών μοντέλων, τα οποία μπορούν να ενταχθούν σε μία εκ των δύο προαναφερόμενων κατηγοριών (αυτά που υποστηρίζουν την μηχανιστική υπόθεση και σε αυτά που υποστηρίζουν την υπόθεση βιωσιμότητας). Τα τελευταία χρόνια, γίνεται η προσπάθεια όλα τα μηχανιστικά μοντέλα να λάβουν υπόψη τους τη μη γραμμικότητα των λογαριθμικών καμπυλών επιβίωσης – χρόνου.

Οι Prokop και Humphrey (1970), δήλωσαν πως το μεγαλύτερο μέρος των μαθηματικών μοντέλων της κινητικής της απολυμαντικής δράσεως, που έχουν προταθεί, είναι ιδιαίτερα σύνθετα, για να έχουν πρακτική εφαρμογή. Γενικά, τα μοντέλα που προτιμώνται είναι συνήθως το απλό μοντέλο των Chick –Watson (γραμμικό λογαριθμικό μοντέλο) ή το πιο χρήσιμο εμπειρικό μοντέλο του Hom (1972), το οποίο ταιριάζει στα μη γραμμικά

δεδομένα της καμπύλης λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο t (Lambert & Johnston, 2000).

Στο Σχήμα 5.4 αναλύονται οι διαφορετικές κινητικές περιγραφές της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών.



Σχήμα 5.4: Τυπικές καμπύλες επιβίωσης των μικροοργανισμών (Gyurek & Finch, 1998)

Η καμπύλη Α αναπαριστά μια κινητική απενεργοποίησης πρώτης τάξης ή ισοδύναμα εκθετικής θανάτωσης των μικροοργανισμών. Η καμπύλη Β, αναπαριστά επίσης μια εκθετική θανάτωση των μικροοργανισμών, η οποία όμως ακολουθεί μια αρχική χρονική υστέρηση (ώμος – shoulder) που αποδίδεται στην ανεπαρκή ανάμιξη, τη καθυστερημένη διάχυση του απολυμαντικού μέσου στο σημείο εφαρμογής του και/ή στους πολλαπλούς στόχους των μικροοργανισμών που είναι αναγκαίο να πληγούν για την επίτευξη της απενεργοποίησης. Οι πολυφασικές καμπύλες Γ και Δ, αποδίδονται στη σωρεία οργανισμών που συναντώνται και στην παρουσία πολλών ιδιαίτερων υπό-πληθυσμών με ποικιλία αντιστάσεων ως προς το απολυμαντικό μέσο. Η καμπύλη Δ υποδηλώνει πως η αρχική ταχεία απενεργοποίηση των μικροοργανισμών ακολουθείται από μια μείωση του ρυθμού θανάτωσης με την πάροδο του χρόνου. Τα κινητικά μοντέλα, που αναπτύχθηκαν για την περιγραφή της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, επιδιώκουν να περιγράψουν μαθηματικά τις προαναφερόμενες καμπύλες και αναλύονται εκτενώς στην ενότητα που ακολουθεί (Gyurek & Finch, 1998).

5.6.2. Σύνοψη μοντέλων κινητικής απενεργοποίησης μικροοργανισμών

Ένα βασικό χαρακτηριστικό γνώρισμα των κινητικών μοντέλων είναι η απλοποίηση και η εξιδανίκευση των πολύπλοκων φαινομένων. Τα κινητικά μοντέλα βασίζονται στην ικανοποίηση των ακόλουθων παραμέτρων για αντιδραστήρες διαλείπουσας λειτουργίας (ή ισοδύναμα ιδανικής εμβολικής ροής): **(i)** καθόλου ανακυκλοφορίες, **(ii)** ομοιόμορφη διασπορά των μορίων των οργανισμών και του απολυμαντικού, **(iii)** ικανοποιητική ανάμιξη, **(iv)** σταθερή θερμοκρασία και pH και **(v)** σταθερή συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου σε όλη τη χρονική διάρκεια της επαφής (*Gyurek & Finch, 1998*).

Τα περισσότερα από τα κινητικά μοντέλα έχουν προκύψει από την ακόλουθη διαφορική σχέση:

$$\frac{dN_t}{dt} = k \cdot C^n \cdot m \cdot N_t^x \cdot t^{m-1} \quad (5.44)$$

όπου:

dN_t/dt = ο ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσης των μικροοργανισμών με το χρόνο

k = σταθερά ρυθμού απενεργοποίησης, υπολογίζεται πειραματικά

N_0 = ο αριθμός των μικροοργανισμών την χρονική στιγμή $t = 0$ (πριν την έναρξη της απολύμανσης)

N_t = ο αριθμός των μικροοργανισμών που εμφανίζονται μετά την απολύμανση, σε χρόνο t

m, n, x = εμπειρικές σταθερές

Στην συνέχεια γίνεται μια αναλυτική παρουσίαση των κυριότερων κινητικών μοντέλων που συναντώνται στη βιβλιογραφία αναφορικά με την απενεργοποίηση των μικροοργανισμών.

Η παρατήρηση του Hariet Chick ότι όσο αυξάνεται το χρονικό διάστημα της επαφής για μια συγκεκριμένη συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου, τόσο αυξάνει το ποσοστό καταστροφής των μικροβίων, εκφράζεται με τη σχέση (3.1) και αναλύθηκε εκτενώς σε προηγούμενη ενότητα (δες παράγραφο 3.4.1). Ο Herbert Watson διαπίστωσε όπως προαναφέραμε ότι η σταθερά του ρυθμού αδρανοποίησης σχετιζόταν με τη συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου, σύμφωνα με την σχέση (3.7). Συνδυάζοντας τις εκφράσεις που προτάθηκαν από τους Chick και Watson σε διαφορετική μορφή, καταλήγουμε (*Hass & Karra,*

1984), στο απλό μοντέλο των Chick –Watson (γραμμικό λογαριθμικό μοντέλο - καμπύλη Α σχήματος 5.4), που αναλύθηκε στην ενότητα 3.4.2.

Στην πράξη παρατηρούνται αποκλίσεις από το νόμο του Chick. Ο ρυθμός καταστροφής, αντί να είναι σταθερός, άλλοτε αυξάνει και άλλοτε ελαττώνεται με το χρόνο (φαινόμενα αυτοκατάλυσης ή επιβράδυνσης). Η συνθήκη αυτή μπορεί να εκφραστεί από τη σχέση (Μαρκαντωνάτος, 1990):

$$\ln \frac{N_t}{N_0} = -k \cdot t^m \quad (5.45)$$

όπου m: σταθερά

Αν $m = 1$, ο ρυθμός καταστροφής είναι σταθερός

Αν $m > 1$, ο ρυθμός καταστροφής αυξάνει με το χρόνο

Αν $m < 1$, ο ρυθμός καταστροφής ελαττώνεται με το χρόνο

Ο προσδιορισμός των σταθερών k, m για κάθε συγκεκριμένη περίπτωση γίνεται με σχεδίαση σε διπλή λογαριθμική κλίμακα των αντίστοιχων τιμών των $-\ln (N_t/N_0)$ και t, που δίνουν ευθεία γραμμή με τη σχέση:

$$\log \left(-\ln \frac{N_t}{N_0} \right) = \log k = m \cdot \log t \quad (5.46)$$

Στην περίπτωση της αυτοκατάλυσης ισχύει επίσης η εξίσωση που ακολουθεί (Λέκκας, 1996):

$$-\frac{dN_t}{dt} = k_1 N_t + k_2 N_t \cdot (N_0 - N_t) \quad (5.47)$$

όπου, ο όρος $k_2 N_t (N_0 - N_t)$ εκφράζει την επιτάχυνση και k_1, k_2 είναι οι σταθερές του συστήματος και εξαρτώνται από το είδος του απολυμαντικού, τη θερμοκρασία και το pH.

Ο Gard (1957), επισήμανε ότι ο ρυθμός αδρανοποίησης δεν είναι σταθερός αλλά μειώνεται με το χρόνο (περίπτωση της επιβράδυνσης), ακόμη και όταν η συγκέντρωση του απολυμαντικού διατηρούνταν σταθερή, έχοντας ως αποτέλεσμα την εμφάνιση της ουράς και πρότεινε την ακόλουθη σχέση (Selleck et al., 1978) & (Metcalf & Eddy, 2003):

$$-\frac{dN_t}{dt} = \left(\frac{k}{1 + a(Ct)} \right) \cdot C \cdot N_t$$

ή ισοδύναμα (σε ολοκληρωμένη μορφή) (5.48)

$$\frac{N_t}{N_0} = \frac{1}{[1 + a(Ct)]^{k/a}}$$

όπου:

dN_t/dt = ο ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσης των μικροοργανισμών με το χρόνο

k = σταθερά ρυθμού απενεργοποίησης, πρώτης τάξης, σε χρόνο $t = 0$

N_0 = ο αριθμός των μικροοργανισμών την χρονική στιγμή $t = 0$ (πριν την έναρξη της απολύμανσης)

N_t = ο αριθμός των μικροοργανισμών που εμφανίζονται μετά την απολύμανση σε χρόνο t

a = ο συντελεστής επιβράδυνσης

C = η συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου, που θεωρείται σταθερή σε όλο το χρονικό διάστημα της απολύμανσης, mg/l

t = χρόνος επαφής, min

Στις αρχές του 1970, ο Collins διεξήγαγε πειράματα στην απολύμανση διαφόρων αποβλήτων. Κάνοντας χρήση ενός αντιδραστήρα διαλείποντος έργου, το περιεχόμενο του οποίου είναι καλώς αναμεμιγμένο, οι Collins και Selleck διαπίστωσαν ότι η μείωση των κολοβακτηριδίων κατά τη χλωρίωση μιας πρωτοβάθμιας εκροής, ακολουθούσε μια γραμμική σχέση όταν αποδίδονταν σε ένα διπλά λογαριθμικό χαρτί και περιγράφονταν επιτυχώς από τη σχέση (*White, 1999*):

$$\frac{N_t}{N_0} = (1 + 0,23 \cdot C_R \cdot t)^{-3} \quad (5.49)$$

όπου: C_R = η συγκέντρωση του υπολειμματικού χλωρίου που απομένει στο τέλος του χρόνου t .

Πρέπει να σημειωθεί ότι η παραπάνω αρχική έκφραση της εξίσωσης του Collins λάμβανε υπόψη της το φαινόμενο της ουράς, αλλά δεν λάμβανε υπόψη της το φαινόμενο της χρονικής υστέρησης, στην καμπύλη $\log (N_0/N_t)$ ως προς $\log t$. Μια τροποποιημένη έκφραση του αρχικού μοντέλου του Collins, για την απολύμανση δευτεροβάθμιας εκροής, που λαμβάνει υπόψη της τόσο το φαινόμενο χρονικής υστέρησης όσο και το φαινόμενο της ουράς, προτάθηκε από τους (*Selleck et al., 1978*) και αργότερα από τον (*White, 1999*). Έτσι, πρότειναν σε διαφορετική μορφή την ακόλουθη σχέση:

$$-\frac{dS}{dt} = \frac{nC}{b} \cdot S^{\frac{(n+1)}{n}}, \text{ με } S = \frac{N_t}{N_o} \quad (5.50)$$

Η ολοκληρωμένη μορφή της παραπάνω εξίσωσης είναι:

$$S = \frac{N_t}{N_o} = \left[\frac{b}{C_R \cdot t} \right]^n, \text{ για } C_R t \geq b$$

και (5.51)

$$S = \frac{N_t}{N_o} = 1, \text{ για } C_R t < b$$

όπου:

C_R = η συγκέντρωση του υπολειμματικού χλωρίου που απομένει μετά από χρόνο t (θεωρείται ότι παραμένει σταθερή με την πάροδο του χρόνου).

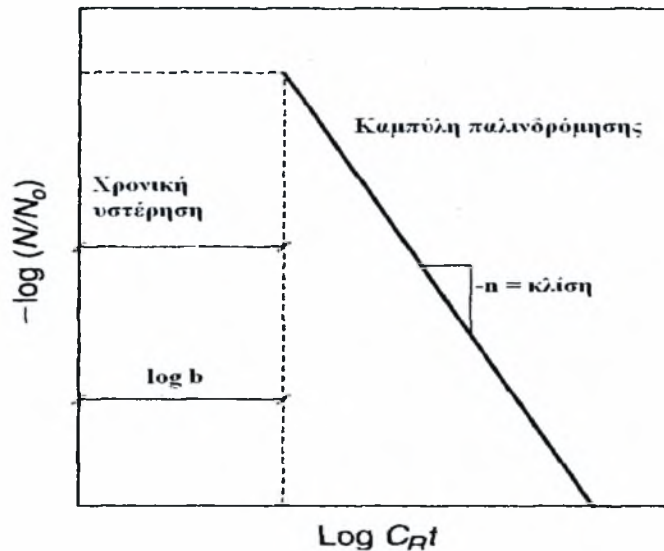
t = ο χρόνος επαφής

n = η κλίση της καμπύλης απενεργοποίησης των κολοβακτηριδίων

b = η τιμή που η καμπύλη τέμνει τον άξονα x , δηλαδή όταν $N/N_0 = 1$ ή ισοδύναμα $\log(N/N_0) = 0$ (βλ. Σχήμα 5.5)

Τυπικές τιμές για τους συντελεστές n και b , για δευτεροβάθμια εκροή και για κολοβακτηρίδια και κολοβακτηρίδια περιττωματικής προελεύσεως, είναι 2,8 και 4 και 2,8 και 3, αντίστοιχα. Ωστόσο, εξαιτίας της ποικιλομορφίας της χημικής σύστασης που παρουσιάζουν οι δευτεροβάθμιες εκροές καθώς και εξαιτίας της διαφοροποίησης της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων που εμπεριέχονται σε αυτές, συνίσταται για μεγαλύτερη ακρίβεια να εκτιμώνται οι σταθερές αυτές για το κάθε απόβλητο (*Metcalf & Eddy, 2003*).

Η τελευταία αυτή σχέση τείνει να χρησιμοποιείται περισσότερο τελευταία στην περιγραφή της διαδικασίας της χλωρίωσης, επειδή έχει προκύψει από τη συνηθισμένη πρακτική της χλωρίωσης αστικών αποβλήτων.



Σχήμα 5.5 : Επεξηγηματική καμπύλη για την εφαρμογή της εξίσωσης (5.51)

Ο Haas, ένα χρόνο αργότερα (Haas, 1979), αφού αναγνώρισε την συνεισφορά των Selleck et al. στην χλωρίωση των αποβλήτων, πρότεινε την ακόλουθη διόρθωση όσον αφορά την ολοκληρωμένη μορφή της εξίσωσης 5.50:

$$S = \frac{N_t}{N_o} = \left(1 + \frac{C \cdot t}{b}\right)^{-n} \quad (5.52)$$

Το εμπειρικό αυτό μοντέλο έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς για την περιγραφή των καμπυλών επιβίωσης, που εμφανίζουν αρχικά μια χρονική υστέρηση (ώμος) και εν συνεχεία ένα επιβραδυνόμενο ρυθμό απενεργοποίησης, φαινόμενο αρκετά συνηθισμένο στη χλωρίωση αποβλήτων (βλ. καμπύλη Γ Σχήματος 5.4), με τις τιμές των b και n να σχετίζονται άμεσα με το λόγο χλωρίου/αζώτου (Gyurek & Finch, 1998) και (Haas & Kaara, 1984).

Το εμπειρικό μοντέλο του Hom (Hom, 1972) υποθέτει την ακόλουθη διαφορική εξίσωση για την περιγραφή της απολύμανσης:

$$\frac{dN_t}{dt} = -k \cdot C^n \cdot m \cdot N_t \cdot t^{m-1} \quad (5.53)$$

όπου:

m = εκθέτης του χρόνου, εμπειρική σταθερά του Hom,

ενώ οι υπόλοιποι συμβολισμοί είναι όμοιοι με αυτούς της σχέσης Chick –Watson.

Επιλύοντας την παραπάνω διαφορική εξίσωση προκύπτει η ακόλουθη σχέση:

$$\log \frac{N_t}{N_0} = -k \cdot C^n \cdot t^m \quad (5.54)$$

Οι τιμές των n , m , k μπορούν να προκύψουν από την γραφική παράσταση του $\log(\log(N_0/N_t))$ ως προς το χρόνο $\log t$ και ως προς τη συγκέντρωση $\log C$, χρησιμοποιώντας πολλαπλή παλινδρομική ανάλυση. Το μοντέλο αυτό μπορεί να περιγράψει τις καμπύλες Α-Δ του Σχήματος 5.4. Πρέπει να σημειωθεί ότι αν $m = 1$, τότε η εξίσωση ισοδυναμεί με το μοντέλο των Chick – Watson. Επιπλέον, αν $m > 1$ τότε η γραφική παράσταση $\log (N_0/N_t)$ ως προς $\log t$, δείχνει την χρονική υστέρηση (ώμος), ενώ αν $m < 1$ μπορεί να παρατηρηθεί το φαινόμενο της ουράς (*Lambert & Johnston, 2000*) και (*Gyurek & Finch, 1998*).

Το μοντέλο του Hom, που αναλύθηκε παραπάνω, μπορεί να μετασχηματιστεί ώστε να μην περιέχει τον χρόνο ως ανεξάρτητη μεταβλητή (τροποποιημένο μοντέλο του Hom) ως εξής (*Greene, 2002*):

$$\frac{dN}{dt} = -mN \cdot (kC^n)^{\frac{1}{m}} \cdot \left[-\ln\left(\frac{N}{N_0}\right) \right]^{\left(1-\frac{1}{m}\right)} \quad (5.55)$$

Το ορθολογικό μοντέλο (Rational model), γνωστό και ως εκθετικό μοντέλο (Power law model), αρχικά χρησιμοποιήθηκε για να περιγράψει την απενεργοποίηση των ιών με τη χρήση όζοντος ως απολυμαντικό, σε διαλείπουσας λειτουργίας αλλά και συνεχούς ροής συστήματα και εκφράζεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{dN_t}{dt} = k \cdot C^n \cdot N_t^x \quad (5.56)$$

Το μοντέλο αυτό αποτελεί ένα γενικευμένο νόμο για $m = 1$ και μπορεί να μετασχηματιστεί στο απλό μοντέλο των Chick-Watson για $x = 1$. Η ολοκλήρωση της προαναφερόμενης εξίσωσης, πάντοτε για συστήματα ελεύθερα ζήτησης (demand free => $k, C = \text{ct.}$) και για $x \neq 1$, οδηγεί στην ακόλουθη σχέση:

$$\ln\left(\frac{N}{N_0}\right) = -\frac{1}{x-1} \cdot \ln\left[1 + (x-1) \cdot k \cdot C^n \cdot t \cdot N_0^{x-1}\right] \quad (5.57)$$

Το ορθολογικό μοντέλο μπορεί να περιγράψει την χρονική υστέρηση (shoulder) και την ουρά (tailing-off) των καμπυλών επιβίωσης των μικροοργανισμών ως προς το χρόνο, για $x < 1$ και $x > 1$ αντίστοιχα. Επιπλέον έχει τη δυνατότητα να περιγράψει την επίδραση της αρχικής συγκέντρωσης των μικροοργανισμών στην διεργασία της απολύμανσης. Έτσι, για $x > 1$ η αύξηση της αρχικής συγκέντρωσης N_0 των μικροοργανισμών προκαλεί μείωση του λόγου επιβίωσης N_t/N_0 για τις ίδιες συνθήκες απολύμανσης (Kaymak, 2003) & (Ligie, 2004).

Τέλος, συνδυάζοντας το μοντέλο του Hom και το ορθολογικό μοντέλο που περιγράφηκαν παραπάνω προέκυψε το εκθετικό μοντέλο του Hom (Hom Power Law Model), το οποίο περιγράφεται από τη σχέση:

$$\frac{dN_t}{dt} = k \cdot C^n \cdot m \cdot N_t^x \cdot t^{m-1} \quad (5.58)$$

ή ισοδύναμα σε ολοκληρωμένη μορφή

$$\ln\left(\frac{N}{N_0}\right) = -\frac{1}{x-1} \cdot \ln[1 + (x-1) \cdot k \cdot C^n \cdot t^m \cdot N_0^{x-1}] \quad (5.59)$$

Το μοντέλο αυτό αναμένεται να δώσει μια πολύ καλύτερη ταύτιση με τα πειραματικά δεδομένα τόσο σε σχέση με το μοντέλο του Hom όσο και εν συγκρίσει με το ορθολογικό μοντέλο, για τις περιπτώσεις που η καμπύλη επιβίωσης των μικροοργανισμών έχει τη μορφή Γ (Σχήμα 5.4) δηλαδή ο ρυθμός απενεργοποίησης αρχικά αυξάνει και εν συνεχεία μειώνεται κατά τη διάρκεια της επαφής. Ωστόσο ένα μοντέλο με τέσσερις παραμέτρους δημιουργεί σημαντικά προβλήματα υπολογισμών (Gyurek & Finch, 1998) & (Ligie, 2004).

Εκτός των προαναφερόμενων μοντέλων, έχουν προταθεί και άλλα μοντέλα για την περιγραφή της κινητικής της απολύμανσης των μικροοργανισμών από το χλώριο, με κυριότερα αυτό των πολλαπλών στόχων (multiple target) και το μοντέλο σειριακών γεγονότων (serial event).

Το πρώτο, στηρίζει τη θεωρία του στο γεγονός ότι κάθε μικροοργανισμός (ή συμπαγής μάζα μικροοργανισμών), κατέχει πολλαπλές "θέσεις στόχων", κάθε μια από τις οποίες πρέπει να έρθει σε επαφή με το απολυμαντικό μέσο, για να επιτευχθεί απενεργοποίηση του εν λόγω μικροοργανισμού (ή της συμπαγούς μάζας μικροοργανισμών). Το μοντέλο αυτό ωστόσο δείχνει να είναι ακατάλληλο για την περιγραφή της κινητικής της διεργασίας της απολύμανσης, διότι οι συμπαγείς μάζες των μικροοργανισμών δεν είναι ισοδύναμου μεγέθους

και ως εκ τούτο είναι σχεδόν απίθανο η καταστροφή του κελιού να κατανεμηθεί τυχαία δια μέσου της κοινότητας των μικροοργανισμών.

Η θεωρία του μοντέλου σειριακών γεγονότων από την άλλη, δέχεται ότι ένας οργανισμός έχει πεπερασμένο αριθμό στόχων και συνεπώς απαιτείται πεπερασμένος αριθμός θανατηφόρων γεγονότων για την αδρανοποίησή του. Επιπρόσθετα, υποθέτει πως κάθε θανατηφόρο γεγονός (αντίδραση απολυμαντικού / μικροβίου) είναι πρώτης τάξης αναφορικά με τη συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου. Καθώς η υπόθεση αυτή δεν είναι στην πραγματικότητα σωστή για τα συστήματα απολύμανσης με χλώριο, το εν λόγω μοντέλο είναι γενικά ακατάλληλο για αυτή τη χρήση. Επιπλέον, το μοντέλο των σειριακών γεγονότων δεν μπορεί να προβλέψει το φαινόμενο της ουράς στην λογαριθμική καμπύλη επιβίωσης-χρόνου.

Στον Πίνακα 5.5, δίνονται συγκεντρωτικά τα κυριότερα μοντέλα που έχουν περιγραφεί παραπάνω καθώς και ορισμένες τροποποιημένες μορφές αυτών.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει επίσης η εργασία των *Hassen A. et al., 2000*, οι οποίοι μελέτησαν εργαστηριακά την κινητική απομείωσης δύο ενδεικτικών τύπων βακτηριδίων (βακτήρια περιττωματικής προελεύσεως FC και στρεπτόκοκκοι περιττωματικής προελεύσεως) των δευτεροβάθμια επεξεργασμένων αστικών λυμάτων.

Πιο αναλυτικά, ένα δείγμα δευτεροβάθμια επεξεργασμένων λυμάτων αναμείχθηκε με υποχλωριώδες νάτριο (απολυμαντικό μέσο) σε διάφορες συγκεντρώσεις. Παρατηρήθηκε μια όχι καλή ταύτιση των πειραματικών αποτελεσμάτων με το μοντέλο των Chick-Watson. Για το λόγο αυτό, έγινε μια δεύτερη προσέγγιση όπου υιοθετήθηκε η ιδέα μιας άμεσης απομείωσης των μικροοργανισμών, ακριβώς τη στιγμή της επαφής του χλωρίου με το δείγμα. Στην περίπτωση αυτή το μοντέλο των Chick-Watson μετασχηματίστηκε ως εξής:

$$\frac{N_t}{N_o} = A \exp(-k' \cdot C^n \cdot t) \quad (5.60)$$

όπου, A = η αρχική απομείωση ακριβώς τη στιγμή της επαφής του νερού με το χλώριο. Η τροποποιημένη αυτή μορφή του μοντέλου περιέγραψε με πολύ καλή ακρίβεια την κινητική της απολύμανσης των επιλεγμένων ενδεικτικών βακτηρίων.

Η ίδια διαδικασία πραγματοποιήθηκε από τους *Hassen A. et al., 2000* και για τον έλεγχο του μοντέλου των Collins & Selleck. Παρατηρήθηκε γενικά ασυμφωνία μεταξύ των θεωρητικών και των πειραματικών τιμών για τα ενδεικτικά βακτήρια (σαφώς όμως καλύτερη προσέγγιση από το αρχικό μοντέλο των Chick-Watson). Με στόχο την ακόμη καλύτερη προσέγγιση των πειραματικών αποτελεσμάτων, εισήχθη η σταθερά m στη συγκέντρωση του

υπολειμματικού χλωρίου, καθώς παρατηρήθηκε ότι η συγκέντρωση του χλωρίου επηρέαζε την έξοδο πολύ περισσότερο από ότι ο χρόνος επαφής. Πράγματι, για ένα δεδομένο χρόνο επαφής, η απομείωση των ενδεικτικών βακτηρίων ήταν τόσο μεγάλη όσο και η αύξηση στη συγκέντρωση του χλωρίου. Αντίθετα, για μια δεδομένη συγκέντρωση χλωρίου η απομείωση των βακτηρίων προχωρούσε σχετικά αργά σε σχέση με το χρόνο επαφής. Έτσι, η τροποποιημένη μορφή του μοντέλου, που προτάθηκε από τους ερευνητές και έδωσε μια πολύ καλή περιγραφή της κινητικής της διεργασίας της απολύμανσης, ήταν η ακόλουθη:

$$\frac{N_t}{N_o} = \left[\frac{b}{C_R^m \cdot t} \right]^n, \text{ για } C_{Rt} \geq b$$

και (5.61)

$$\frac{N_t}{N_o} = 1, \text{ για } C_{Rt} < b$$

Είναι σημαντικό να τονίσουμε πως ο προσδιορισμός της κινητικής της αδρανοποίησης των μικροοργανισμών είναι γενικά εμπειρικός και βασίζεται σε εργαστηριακές μελέτες για ένα συγκεκριμένο είδος αποβλήτου. Συνεπώς, γίνεται αντιληπτό πως η εγκυρότητα του καθενός από τα προαναφερόμενα μοντέλα περιορίζεται σε συνθήκες όμοιες με εκείνες που ελήφθησαν κατά την εξαγωγή του.

Οι σταθερές των διαφόρων μοντέλων προσδιορίζονται πειραματικά στο εργαστήριο ή σε εγκαταστάσεις επεξεργασίας με τη μέτρηση σε ένα απόβλητο του αρχικού αριθμού των μικροοργανισμών N_0 και του αριθμού τους N_t που μένει μετά από χρόνο επαφής t , καθώς και της συγκέντρωσης C του απολυμαντικού μέσου που χρησιμοποιήθηκε. Έτσι από την γραφική παράσταση μεταξύ των $\ln (N_t/N_0) - \ln t$, επιτρέπεται ο γραφικός προσδιορισμός των σταθερών (Στάμου & Βογιατζής, 1994).

Πίνακας 5.5 : Συνοπτική περιγραφή των κυριότερων μοντέλων της κινητικής αδρανοποίησης μικροοργανισμών (συνεχίζεται)

A/A	Μοντέλο	Σχέση	Συγγραφέας / Πηγή	Σχόλια
1.	$\frac{dN_t}{dt} = -kN_t$ ή $\ln \frac{N_t}{N_0} = -k \cdot t$	(3.1)	Chick (1908) / (Metcalf & Eddy, 2003)	Πρώτης τάξης. Δεν λαμβάνει υπόψη τη συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου.
2.	$\frac{dN_t}{dt} = -k' \cdot C^n \cdot N_t$ ή $\ln \frac{N_t}{N_0} = -k' \cdot C^n \cdot t$ με $k = k' \cdot C^n$	(3.4), (3.5)	Chick – Watson / (Haas & Karra, 1984) and (Gyurek & Finch, 1998)	<u>Γραμμικό</u> λογαριθμικό μοντέλο (δεν λαμβάνει υπόψη της το φαινόμενο χρονικής υστέρησης, ούτε και το φαινόμενο της ουράς, στην καμπύλη λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο. Επιπλέον, <u>θεώρηση σταθερής συγκέντρωσης απολυμαντικού</u> .)
3.	$-\frac{dN_t}{dt} = \left(\frac{k}{1+a(Ct)} \right) \cdot N_t$ ή $\frac{N_t}{N_0} = \frac{1}{[1+a(Ct)]^{k/a}}$	(5.48)	Gard (1957) / (Metcalf & Eddy, 2003) and (Selleck et al., 1978)	Ο ρυθμός αδρανοποίησης δεν είναι σταθερός, αλλά μειώνεται με το χρόνο (επιβράδυνση), έχοντας ως αποτέλεσμα την εμφάνιση της ουράς στην καμπύλη λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο.
4.	$-\frac{dS}{dt} = \frac{nC}{b} \cdot S^{\frac{(n+1)}{n}}$, με $S = \frac{N_t}{N_0}$ $\frac{N_t}{N_0} = \left[\frac{b}{C_R \cdot t} \right]^n$, για $C_R t \geq b$ $\frac{N_t}{N_0} = 1$, για $C_R t < b$	(5.50), (5.51)	Collins & Selleck / (Selleck et al., 1978) and (Metcalf & Eddy, 2003)	Χρησιμοποιείται κυρίως για περιγραφή της χλωρίωσης. Λαμβάνει υπόψη το ενωμένο διαθέσιμο χλώριο. <u>Λαμβάνει υπόψη της τόσο το φαινόμενο χρονικής υστέρησης όσο και το φαινόμενο της ουράς (μη γραμμικά δεδομένα της λογαριθμικής καμπύλης επιβίωσης ως προς το χρόνο)</u>
N_t = ο αριθμός των μικροοργανισμών σε χρόνο t N_0 = ο αριθμός των μικροοργανισμών την χρονική στιγμή $t = 0$ k = σταθερά ρυθμού αδρανοποίησης βακτηρίων k' = σταθερά αποδεκατισμού (die-off) C = συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου C_R = συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου μετά από χρόνο t t = χρόνος n = σταθερά αραίωσης				

Πίνακας 5.5 : Σύνοπτική περιγραφή των κυριότερων μοντέλων της κινητικής αδρανοποίησης μικροοργανισμών (συνέχεια)

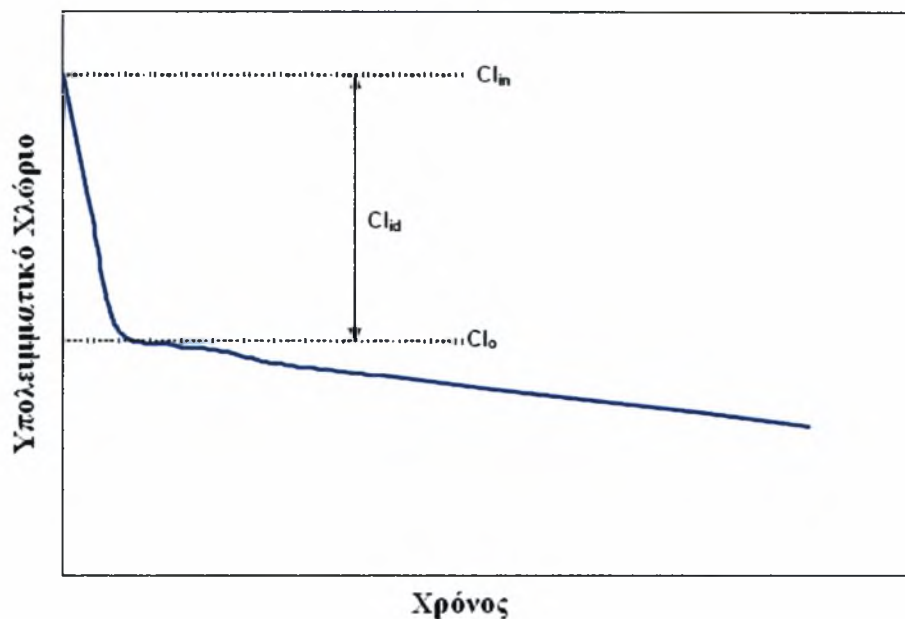
A/A	Μοντέλο	Σχέση	Συγγραφέας / Πηγή	Σχόλια
5.	$\frac{dN_t}{dt} = -k \cdot C^n \cdot m \cdot N_t \cdot t^{m-1}$ ή $\log \frac{N_t}{N_0} = -k \cdot C^n \cdot t^m$	(5.53), (5.54)	Hom (1972) / (Lambert & Johnston, 2000) and (Gyurek & Finch, 1998)	Εμπειρικό μοντέλο, λαμβάνει υπόψη τα μη γραμμικά δεδομένα της λογαριθμικής καμπύλης επιβίωσης ως προς το χρόνο. <u>Θεώρηση σταθερής συγκέντρωσης απολύμαντικού.</u>
6.	$\frac{dN}{dt} = -mN \cdot (kC^n)^{\frac{1}{m}} \cdot \left[-\ln \left(\frac{N}{N_0} \right) \right]^{\left(\frac{1}{m} - 1 \right)}$	(5.55)	Τροποποιημένο μοντέλο του Hom (Modified Hom)/ (Greene, 2002)	Μετασχηματισμός του μοντέλου Hom ώστε να μην περιέχει τον χρόνο ως ανεξάρτητη μεταβλητή.
7.	$\frac{N_t}{N_0} = e^{-kC} \sum_{i=0}^{i-1} \frac{(kC)^i}{i!}$	(5.62)	Μοντέλο συστοιχίας γεγονότων (Series event model) Severin et al., (1984)/ (Pretorius & Pretorius, 1999)	Το k αποτελεί τη σταθερά του ρυθμού αντίδρασης δεύτερης τάξης και το j αποτελεί ένα ακέραιο αριθμό που παριστάνει τον αριθμό των φονικών αντιδράσεων για ένα απλό οργανισμό. Ο όρος kC, μπορεί να αντικατασταθεί από το K, που είναι η φαινομενική κινητική σταθερά.
8.	$\frac{dN_t}{dt} = k \cdot C^n \cdot N_t^x$ & $\ln \left(\frac{N}{N_0} \right) = -\frac{1}{x-1} \cdot \ln [1 + (x-1) \cdot k \cdot C^n \cdot t \cdot N_0^{x-1}]$	(5.56)	Rational model ή Power Law model/ (Kaymak, 2003) & (Ligie, 2004)	Αντίθετα από τα μοντέλα των Chick-Watson και Hom, που θεωρούν μιας πρώτης τάξης αντίδραση, το μοντέλο αυτό χρησιμοποιεί τον power law για την περιγραφή της απολύμανσης. Όπως και το μοντέλο του Hom προβλέπει τον “ώμο” και την “ουρά” για $x < 1$ και $x > 1$, αντίστοιχα. Για $x = 1$, μεταπίπτει στο μοντέλο των Chick-Watson.
<hr/>				
N _t = ο αριθμός των μικροοργανισμών σε χρόνο t N ₀ = ο αριθμός των μικροοργανισμών την χρονική στιγμή t = 0 k = σταθερά ρυθμού αδρανοποίησης βακτηρίων m = εκθέτης του χρόνου του, εμπειρική σταθερά του Hom				
C = συγκέντρωση του απολύμαντικού μέσου n = σταθερά αραίωσης t = χρόνος x = σταθερά				

Πίνακας 5.5 : Σύνοπτική περιγραφή των κυριότερων μοντέλων της κινητικής αδρανοποίησης μικροοργανισμών (συνέχεια)

A/A	Μοντέλο	Σχέση	Συγγραφέας / Πηγή	Σχόλια
Τα μοντέλα που απαριθμήθηκαν προηγούμενος προέρχονται από διαφορικούς νόμους που υποθέτουν ιδανική εμβολική ροή και μια σταθερή συγκέντρωση απολυμαντικού μέσου κατά μήκος του αντιδραστήρα. Στην πραγματικότητα η συγκέντρωση του απολυμαντικού μειώνεται κατά τη διάρκεια της επαφής καθώς στην πράξη δεν συναντώνται συστήματα ελεύθερα – ζήτησης (demand free). Συνεπώς ο διαφορικός νόμος μπορεί να μετασχηματιστεί ώστε να λαμβάνει υπόψη του και τις συνθήκες ζήτησης απολυμαντικού και εκφράζεται ως εξής:				
<div>$\frac{dN_t}{dt} = k \cdot m \cdot N_t^x \cdot C_0^n \cdot e^{-k^* \cdot t \cdot n} \cdot t^{m-1} \quad (5.63)$</div>				
9.	$\ln \frac{N_t}{N_0} = -\frac{k \cdot C_0^n}{nk^*} \cdot [1 - \exp(-nk^* t)]$	(5.64)	Τροποποιημένο μοντέλο του Chick – Watson / (Cho et al., 2003) and (Gyurek & Finch, 1998)	Σε αντιδιαστολή με το απλό μοντέλο των Chick-watson, λαμβάνει υπόψη και την απομείωση της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου(k^*).
10.	$\ln \frac{N_t}{N_0} = -k \cdot C_0^n \left[\frac{m}{(-nk^*)} \right]^m \cdot [1 - \exp(-nk^* t / m)]^m$	(5.65)	Τροποποιημένο μοντέλο του Hom (Haas & Joffe 1994)/ (Cho et al., 2003) and (Gyurek & Finch, 1998)	Σε αντίθεση με το απλό μοντέλο του Hom, λαμβάνει υπόψη και την απομείωση της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου(k^*). Εκτίμηση της αποτελεσματικότητας της απολύμανσης σε εμβολική ροής ή διαλείπουσας λειτουργίας συστήματα απολύμανσης.
11.	$-\frac{dS}{dt} = \frac{nC_0 \cdot e^{-k^* \cdot t}}{b} \cdot S^{(n+1)/n}$	(5.66)	Τροποποιημένο μοντέλο των Collins & Selleck / (Gyurek & Finch, 1998)	Σε αντιδιαστολή με το απλό μοντέλο των Collins & Selleck, λαμβάνει υπόψη και την απομείωση της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου(k^*).
N_t = ο αριθμός των μικροοργανισμών σε χρόνο t N_0 = ο αριθμός των μικροοργανισμών την χρονική στιγμή $t = 0$ k = σταθερά ρυθμού αδρανοποίησης βακτηρίων k^* = σταθερά ρυθμού απομείωσης απολυμαντικού μέσου, πρώτης τάξης m = εκθέτης του χρόνου του, εμπειρική σταθερά του Hom				
C_0 = αρχική συγκέντρωση του απολυμαντικού μέσου n = σταθερά αραίωσης t = χρόνος x = σταθερά				

5.7. Μοντέλα κινητικής απομείωσης του χλωρίου

Η κατανάλωση του χλωρίου κατά τη διάρκεια της διεργασίας της απολύμανσης των αστικών λυμάτων ακολουθεί δύο στάδια, που απεικονίζονται στο Σχήμα 5.6 και τα οποία χαρακτηρίζονται ως εξής (Hassen *et al.*, 2000):



Σχήμα 5.6 : Στάδια κατανάλωσης του χλωρίου

- Ένα αρχικό πολύ γρήγορο στάδιο, που αντιστοιχεί στην άμεση κατανάλωση του προστιθέμενου χλωρίου, ως αποτέλεσμα των αντιδράσεών του με τις απομειούμενες ουσίες που εμπεριέχονται στα λύματα. Το στάδιο αυτό, είναι γνωστό ως “ικανοποίηση της άμεσης ζήτησης” και δείχνει να είναι γενικά ακαριαίο. Η άμεση ζήτηση περιγράφεται επιτυχώς από τη σχέση:

$$Cl_{id} = Cl_{in} - Cl_0 \quad (5.67)$$

όπου: Cl_{id} = η άμεση ζήτηση του χλωρίου, (mg/l)

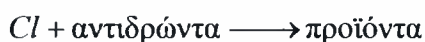
Cl_{in} = η εφαρμοζόμενη ποσότητα χλωρίου, (mg/l)

Cl_0 = το συνολικό αρχικό ποσό υπολειμματικού χλωρίου, (mg/l)

- Ένα δεύτερο αργό στάδιο, κατά τη διάρκεια του οποίου το υπολειμματικό χλώριο μετασχηματίζεται ακαριαία σε ελεύθερο και ενωμένο χλώριο. Το στάδιο αυτό

παρουσιάζει το κύριο ενδιαφέρον στην διεργασία της απολύμανσης καθώς το υπολειμματικό χλώριο είναι διαθέσιμο πλέον να ασκήσει την αντισηπτική του ισχύ. Είναι λοιπόν ξεκάθαρο πως στη μοντελοποίηση της κατανάλωσης του χλωρίου ή της διεργασίας της απολύμανσης, λαμβάνεται υπόψη συνήθως μόνο το δεύτερο στάδιο το οποίο μπορεί να μετρηθεί.

Οι χημικές ουσίες που σχηματίζονται κατά τη διάλυση του χλωρίου στο νερό λαμβάνουν μέρος σε πολλές αντιδράσεις με τα συστατικά που εμπεριέχονται στην κύρια μάζα του νερού, οργανικής και ανόργανης φύσης. Μελέτες που έχουν διεξαχθεί πάνω στην κατανόηση της απομείωσης του χλωρίου, στα συστήματα τροφοδότησης πόσιμου νερού, έχουν εξάγει αρκετά μοντέλα για την περιγραφή της απομείωσης του απολυμαντικού μέσου. Επειδή όπως προαναφέραμε δεν είναι εφικτή η περιγραφή όλων των αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα, η μοντελοποίηση βασίστηκε στην υπόθεση της ακόλουθης συνολικής αντίδρασης:



όπου, ως αντιδρώντα ορίζονται όλες οι ουσίες που εμπεριέχονται στο νερό (ή λύματα) και ενδεχομένως να αντιδρούν με το χλώριο. Η αντίδραση αυτή εμπεριέχει όλες τις πιθανές αντιδράσεις, κάθε μια από τις οποίες χαρακτηρίζεται από το δικό της μηχανισμό και την δική της κινητική. Εξαιτίας της πολυπλοκότητας αυτής αλλά και επειδή το σύνολο των αντιδρώντων είναι ακόμη και σήμερα άγνωστο, τα μοντέλα υιοθέτησαν την προσέγγιση του “μαύρου κουτιού” σύμφωνα με την οποία οι απλές αντιδράσεις, που θεωρούνται ότι επιδρούν στην απομείωση του χλωρίου, δεν λαμβάνονται υπόψη ξεχωριστά αλλά ως σύνολο με μια γενική ταχύτητα και ένα γενικό κινητικό νόμο.

Από την θεωρία της χημικής κινητικής είναι γνωστό ότι ο ρυθμός των αντιδράσεων αυτών εκφράζεται επιτυχώς από μια σχέση της μορφής:

$$\frac{dC}{dt} = -k \cdot C^n \cdot [\text{Αντιδρ.}]^m \quad (5.68)$$

όπου:

C = η συγκέντρωση του χλωρίου

$[\text{Αντιδρ.}]$ = η συνολική συγκέντρωση όλων των ειδών που αντιδρούν με το χλώριο

k = κινητική σταθερά ή σταθερά του ρυθμού αντίδρασης

n = η τάξη της αντίδρασης όσον αφορά το χλώριο

m = η τάξη της αντίδρασης όσον αφορά τα αντιδρώντα

Για μια συγκεκριμένη αντίδραση, τα k , n , m είναι ανεξάρτητα των συγκεντρώσεων των συστατικών που συμμετέχουν στην αντίδραση (είτε του χλωρίου, είτε των αντιδρώντων), επίσης τα n , m είναι χαρακτηριστικά μεγέθη της συγκεκριμένης αντίδρασης, ενώ το k μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία. Στην πραγματικότητα, αν υποθέσουμε ότι η συγκέντρωση των αντιδρώντων βρίσκεται σε περίσσεια συγκρινόμενη με τη συγκέντρωση του χλωρίου, δηλαδή δεν μεταβάλλεται ουσιαστικά κατά τη διάρκεια της αντίδρασης ($C_{\text{αντιδρ.}} = C_{\text{αντιδρ.,0}}$), τότε η προηγούμενη εξίσωση μπορεί να εκφραστεί ως ρυθμός ψευδο – πρώτης τάξης, ως εξής :

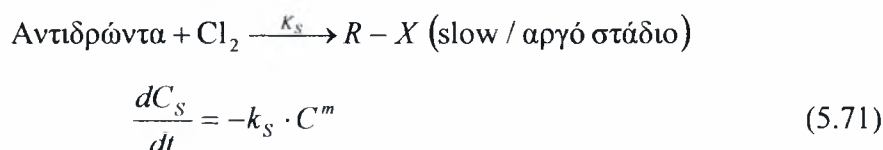
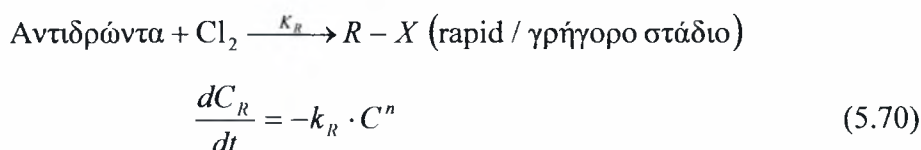
$$\frac{dC}{dt} = -k' \cdot C^n \quad (5.69)$$

με k' την φαινομενική σταθερά του ρυθμού αντίδρασης, που εξαρτάται από τη συγκέντρωση των συστατικών που αντιδρούν με το χλώριο. Είναι $k' = k [\text{Αντιδρ.}]^m$.

Τα κλασικά μοντέλα, που συναντώνται στη βιβλιογραφία, για την περιγραφή των αντιδράσεων του χλωρίου, είναι πρώτης τάξης αναφορικά με τη συγκέντρωση του χλωρίου. Ένας τέτοιος νόμος υπογραμμίζει ότι η ταχύτητα της αντίδρασης είναι ανάλογη της συγκέντρωσης του αντιδρώντος, με τη σταθερά της αναλογίας να είναι ίση με τη σταθερά k' . Με άλλα λόγια η συγκέντρωση του χλωρίου απομειώνεται εκθετικά ως προς το χρόνο.

Με σκοπό την αναβάθμιση της υπεραπλουστευμένης έκφρασης της απομείωσης του χλωρίου με βάση την κινητική πρώτης τάξης, διάφορες άλλες μελέτες πρότειναν τις κινητικές που συνοψίζονται στον Πίνακα 5.6. Η κινητική n -οστής τάξης, δηλώνει πως η ταχύτητα της αντίδρασης είναι ανάλογη της n -οστής συγκέντρωσης του χλωρίου. Το περιορισμένο μοντέλο πρώτης τάξης από την άλλη, υποθέτει ότι ένα κλάσμα από την αρχική συγκέντρωση του χλωρίου C^* , παραμένει σταθερό και μόνο η εναπομείνουσα συγκέντρωση αυτού $C_0 - C^*$, απομειώνεται εκθετικά ακολουθώντας μια κινητική πρώτης τάξης. Το μοντέλο δεύτερης τάξης, αναφορικά με τη συγκέντρωση του χλωρίου και τη συγκέντρωση όλων των αντιδρώντων που συνεισφέρουν στην κατανάλωση αυτού, υποθέτει ότι η ταχύτητα της αντίδρασης είναι ανάλογη των συγκεντρώσεων και των δύο ειδών (χλώριο και αντιδρώντα) (Vieira et al., 2004).

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης, το οποίο υποθέτει δύο συστατικά στην αντίδραση, καθένα από τα οποία απομειώνεται ακολουθώντας μια κινητική πρώτης τάξης. Πιο αναλυτικά, ένα κλάσμα x της αρχικής συγκέντρωσης του χλωρίου $x C_0$, απομειώνεται εκθετικά με ένα ρυθμό k_R , ενώ η εναπομείνουσα ποσότητα $(1-x)C_0$ απομειώνεται επίσης εκθετικά αλλά με ένα διαφορετικό ρυθμό k_S , ως εξής (*Chang et al., 2006*):



όπου:

C_R : η συγκέντρωση του χλωρίου που συμμετέχει σε μια υποθετική ανεξάρτητη ταχεία αντίδραση

C_S : η συγκέντρωση του χλωρίου που συμμετέχει σε μια υποθετική ανεξάρτητη αργή αντίδραση

R, X : χλωριωμένα παραπροϊόντα

n, m : η τάξη της αντίδρασης για το γρήγορο και το αργό στάδιο αντίστοιχα.

Ολοκληρώνοντας τις παραπάνω εξισώσεις, με $C_{R,0} = x C_0$ και $C_{S,0} = (1-x)C_0$, η συγκέντρωση του χλωρίου σε κάθε χρονική στιγμή, μπορεί να δοθεί από την σχέση:

$$C(t) = \left[-k_R \cdot t \cdot (-n+1) + x \cdot C_0^{-n+1} \right]^{\frac{1}{-n+1}} + \left[-k_S \cdot t \cdot (-m+1) + x \cdot C_0^{-m+1} \right]^{\frac{1}{-m+1}} \quad (n, m \neq 1)$$

και

$$C(t) = C_0 \left\{ x \cdot e^{-k_R t} + (1-x) \cdot e^{-k_S t} \right\} \quad (n, m = 1) \quad (5.72)$$

όπου:

$C(t)$ = η συγκέντρωση του χλωρίου σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή, mg/l

C_0 = η αρχική συγκέντρωση (δόση) του χλωρίου

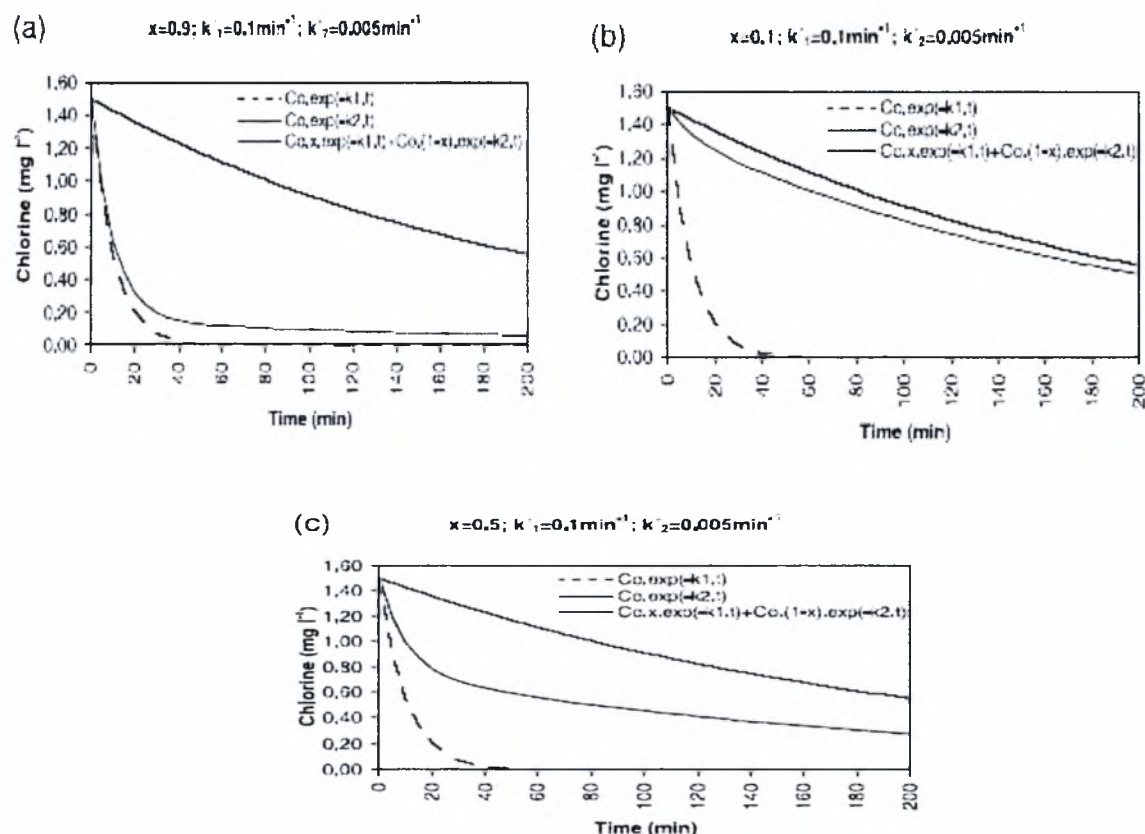
x = το κλάσμα της ζήτησης του χλωρίου που αποδίδεται στις ταχείες αντιδράσεις

k_R = η σταθερά του ρυθμού των γρήγορων αντιδράσεων

k_s = η σταθερά του ρυθμού των αργών αντιδράσεων

Στο σημείο αυτό κρίνεται σκόπιμη η αναφορά στην εργασία των Vieira et al. (2004), οι οποίοι μελέτησαν μεταξύ άλλων την απόδοση πέντε εναλλακτικών μοντέλων, για την περιγραφή της κινητικής της απομείωσης του χλωρίου, τα οποία συνοψίζονται στον Πίνακα 5.6. Το βασικό συμπέρασμα της εργασίας αυτής ήταν η επικύρωση πως το μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης δίνει την καλύτερη ταύτιση με τα πειραματικά αποτελέσματα, με το μοντέλο n-οστής τάξεως να αποτελεί το δεύτερο σε ακρίβεια μοντέλο.

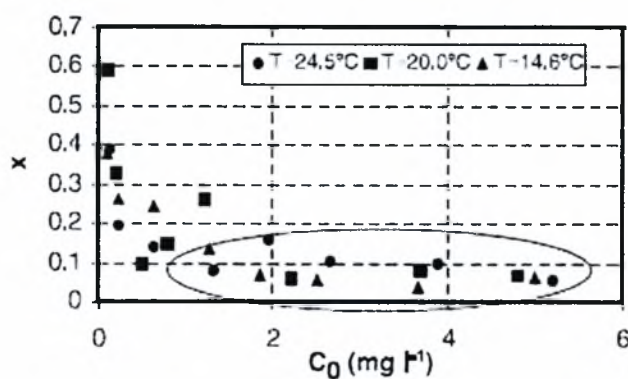
Επιπρόσθετα, οι ερευνητές προσπάθησαν να καθορίσουν τις συνθήκες υπό τις οποίες το απλό μοντέλο πρώτης τάξεως μπορεί να χρησιμοποιηθεί έναντι του μοντέλου παράλληλης πρώτης τάξης, στην περιγραφή της κινητικής της απομείωσης του χλωρίου, χωρίς να αποτελεί σοβαρή πηγή σφάλματος. Συγκεκριμένα καταλήξανε στο συμπέρασμα πως σε κάθε περίπτωση που ο πρώτος ή ο δεύτερος όρος της εξίσωσης (5.72) θεωρηθεί αμελητέος, μπορεί να παραληφθεί και επομένως το μοντέλο ανάγεται αυτόματα σε ένα πρώτης τάξεως μοντέλο με σταθερά k_R ή k_s .



Σχήμα 5.7: Επίδραση της ποσότητας x (κλάσμα που συμμετέχει στη γρήγορη αντίδραση) στην κινητική απομείωσης του χλωρίου (Vieira et al., 2004).

Το κλάσμα x της αρχικής ποσότητας του προστιθέμενου χλωρίου, που αντιδρά με ένα γρήγορο ρυθμό, επηρεάζει σημαντικά τη συνολική μορφή των καμπυλών απομείωσης του χλωρίου ως προς το χρόνο, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχήμα 5.7. Για μεγάλες τιμές του x η συνολική καμπύλη απομείωσης του χλωρίου (μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης) ταυτίζεται σχεδόν με ένα μοντέλο πρώτης τάξης με σταθερά k_R . Αντίθετα, για μικρές τιμές του x η συνολική καμπύλη αποδίδεται εξίσου καλά με τη χρήση ενός απλού μοντέλου πρώτης τάξης με σταθερά k_s . Για ενδιάμεσες τιμές του x , η προσομοίωση της κινητικής απομείωσης του απολυμαντικού μέσου με ένα μοντέλο πρώτης τάξης, είναι αρκετά επισφαλής.

Επιπλέον, η αρχική συγκέντρωση του χλωρίου επηρεάζει την ποσότητα x , όπως χαρακτηριστικά μπορεί κανείς να διαγνώσει από την παρατήρηση του Σχήματος 5.8. Η εξάρτηση αυτή παύει να είναι σημαντική για τιμές αρχικής συγκέντρωσης χλωρίου μεγαλύτερες από 1,5 mg/l. Ακόμη, γίνεται σαφές πως μεγάλες τιμές του x συναντώνται μόνο στην περίπτωση που η αρχική συγκέντρωση του χλωρίου είναι εξαιρετικά χαμηλή (<0.1 mg/l).



Σχήμα 5.8: Επίδραση της αρχικής συγκέντρωσης του χλωρίου στο κλάσμα x (κλάσμα που συμμετέχει στη γρήγορη αντίδραση) (Vieira et al., 2004).

Πίνακας 5.6 : Συνοπτική περιγραφή των κυριότερων μοντέλων της κινητικής της απομείωσης του απολυμαντικού μέσου (συνεχίζεται)

A/A	Μοντέλο		Σχέση	Πηγή	Σχόλια
	Διαφορική μορφή	Ολοκληρωμένη μορφή			
1.	<u>Πρώτης τάξης</u> $\frac{dC}{dt} = -k' \cdot C$	$C = C_0 \cdot \exp(-k' t)$	(5.73)	Vieira et al., 2004	Υπεραπλουστευμένη έκφραση.
2.	<u>Δεύτερης τάξης</u> $\frac{dC}{dt} = -k' \cdot C \cdot C_R$	$C = \frac{C_0(1 - C_R)}{1 - C_R \cdot \exp(-k' t)}$	(5.74)	Vieira et al., 2004	Υποθέτει ότι η ταχύτητα της αντίδρασης είναι ανάλογη των συγκεντρώσεων και των δύο ειδών (χλώριο και αντιδρώντα).
3.	<u>n-οστής τάξης</u> $\frac{dC}{dt} = -k' \cdot C^n$	$C = \left(k' t (n-1) + \left(\frac{1}{C_0} \right)^{n-1} \right)^{-\frac{1}{n-1}}$	(5.75)	Vieira et al., 2004	Υποθέτει ότι η συγκέντρωση των αντιδρώντων βρίσκεται σε περίσσεια συγκρινόμενη με τη συγκέντρωση του χλωρίου, δηλαδή δεν μεταβάλλεται ουσιαστικά κατά τη διάρκεια της αντίδρασης ($C_{\text{αντιδρ.}} = C_{\text{αντιδρ.0}}$)
4.	<u>Οριοθετημένο πρώτης τάξης</u> $\frac{dC}{dt} = -k' \cdot (C - C^*)$	$C = C^* + (C_0 - C^*) \exp(-k' t)$	(5.76)	Vieira et al., 2004	Υποθέτει ότι ένα κλάσμα από την αρχική συγκέντρωση του χλωρίου C^* , παραμένει σταθερό και μόνο η εναπομείνουσα συγκέντρωση αυτού $C_0 - C^*$, απομοιώνεται εκθετικά ακολουθώντας μια κινητική πρώτης τάξης.

- C_0 = η αρχική συγκέντρωση (δόση) του χλωρίου, mg/l
- C_R = η συνολική συγκέντρωση όλων των ειδών που αντιδρούν με το χλώριο.
- $C(t)$ = η συγκέντρωση του χλωρίου σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή, mg/l.
- k' = η φαινομενική σταθερά του ρυθμού αντίδρασης, που εξαρτάται από τη συγκέντρωση των συστατικών που αντιδρούν με το χλώριο. Είναι $k' = k [Αντιδρ.]^m$.

Πίνακας 5.7 : Συνοπτική περιγραφή των κυριότερων μοντέλων της κινητικής της απομείωσης του απολυμαντικού μέσου (συνέχεια)

A/A	Μοντέλο		Σχέση	Πηγή	Σχόλια
	Διαφορική μορφή	Ολοκληρωμένη μορφή			
5.	<u>Παράλληλης πρώτης τάξης</u> $\frac{dC_R}{dt} = -k_R \cdot C^n$ (γρήγορο) και $\frac{dC_S}{dt} = -k_S \cdot C^m$ (αργό)	$C(t) = \left[-k_R \cdot t \cdot (-n+1) + x \cdot C_0^{-n+1} \right]^{\frac{1}{-n+1}} + \left[-k_S \cdot t \cdot (-m+1) + x \cdot C_0^{-m+1} \right]^{\frac{1}{-m+1}} \quad (n, m \neq 1)$ και $C(t) = C_0 \{ x \cdot e^{-k_R \cdot t} + (1-x) \cdot e^{-k_S \cdot t} \} \quad (n, m = 1)$	(5.70), (5.71), (5.72)	Chang et al., 2006 & Shon et al., 2004	Υποθέτει ότι ένα κλάσμα x της αρχικής συγκέντρωσης του χλωρίου xC ₀ , απομοιώνεται εκθετικά με ένα ρυθμό k _R (γρήγορο στάδιο), ενώ η εναπομείνασα ποσότητα (1-x)C ₀ απομοιώνεται επίσης εκθετικά αλλά με ένα διαφορετικό ρυθμό k _S (αργό στάδιο)
	όπου C _{R,0} = xC ₀ και C _{S,0} = (1-x)C ₀				
<div>- C(t) = η συγκέντρωση του χλωρίου σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή, mg/l</div> <div>- C₀ = η αρχική συγκέντρωση (δόση) του χλωρίου</div> <div>- x = το κλάσμα της ζήτησης του χλωρίου που αποδίδεται στις ταχείες αντιδράσεις</div> <div>- k_R = η σταθερά του ρυθμού των γρήγορων αντιδράσεων</div> <div>- k_S = η σταθερά του ρυθμού των αργών αντιδράσεων</div>					

6. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ

6.1. Γενικά

Το κεφάλαιο αυτό εστιάζεται στην παρουσίαση των αριθμητικών τεχνικών, που χρησιμοποιούνται στην επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων (ΜΔΕ), που περιγράφηκαν στην προηγούμενη ενότητα. Η ολοκληρωμένη υπολογιστική προσέγγιση, από το αρχικό μαθηματικό μοντέλο έως την τελική αριθμητική λύση, προϋποθέτει την εκτέλεση ορισμένων βημάτων. Το πρώτο βήμα είναι η επιλογή του επιθυμητού επιπέδου προσέγγισης του φυσικού προβλήματος, που σχετίζεται άμεσα με την απαιτούμενη αριθμητική ακρίβεια και τη διαθέσιμη υπολογιστική ισχύ. Το δεύτερο βήμα είναι η επιλογή της μεθόδου διακριτοποίησης των μαθηματικών διατυπώσεων, που συνίσταται από δύο μέρη, τη διακριτοποίηση του χώρου και τη διακριτοποίηση των εξισώσεων. Η διακριτοποίηση του χώρου, επιτυγχάνεται με τον ορισμό ενός πλέγματος και αναφέρεται στην αντικατάσταση του συνεχούς χώρου από ένα πεπερασμένο αριθμό σημείων. Στα σημεία αυτά οι αριθμητικές τιμές των μεταβλητών καθορίζονται από την επίλυση ενός συστήματος αλγεβρικών εξισώσεων που αντικαθιστά τις ΜΔΕ. Η μετατροπή αυτή αποτελεί την διακριτοποίηση των εξισώσεων. Είναι προφανές ότι η ακρίβεια της αριθμητικής προσέγγισης εξαρτάται από το μέγεθος του πλέγματος (το σφάλμα της αριθμητικής προσομοίωσης τείνει στο μηδέν, όταν το μέγεθος του πλέγματος τείνει στο μηδέν, ενώ η ταχύτητά της καθορίζεται από το βαθμό της αριθμητικής διακριτοποίησης).

Μετά τον ορισμό του πλέγματος οι εξισώσεις μπορούν να διακριτοποιηθούν μετασχηματίζοντας τις διαφορικές ή ολοκληρωτικές εξισώσεις σε διακριτές αλγεβρικές, που εμπεριέχουν τις τιμές των αγνώστων στα σημεία του πλέγματος. Η βάση όλων αυτών των αριθμητικών μεθόδων είναι ο μετασχηματισμός των φυσικών εξισώσεων σε ένα αλγεβρικό, γραμμικό σύστημα εξισώσεων.

Για τις περιπτώσεις χρονικά μεταβαλλόμενων προβλημάτων, εμφανίζεται ένα ενδιαμέσο στάδιο, π.χ. ένα σύστημα κανονικών διαφορικών εξισώσεων στο χρόνο, το οποίο με τη σειρά του μέσω ενός σχήματος χρονικής ολοκλήρωσης θα οδηγήσει τελικώς σε ένα αλγεβρικό σύστημα για τους αγνώστους σε μια δεδομένη χρονική στιγμή. Η γραμμικοποίηση της χρονικής παραγώγου περιλαμβάνει γενικά δύο οικογένειες μεθόδων, την ρητή (explicit) και την πεπλεγμένη (implicit).

Στην ρητή μέθοδο, οι τιμές των άγνωστων μεταβλητών στις διακριτοποιημένες χρονικές παραγώγους τη νέα χρονική στιγμή, εξαρτώνται μόνο από τις τιμές των μεταβλητών της ροής στους όρους συναγωγής, διάχυσης και πηγής την αμέσως προηγούμενη χρονική στιγμή. Αυτό επιτρέπει την επίλυση με ένα ελάχιστο αριθμό αριθμητικών ενεργειών σε κάθε χρονικό βήμα. Ωστόσο, το πλεονέκτημα αυτό αντισταθμίζεται από το γεγονός ότι η σταθερότητα και οι συνθήκες σύγκλισης επιβάλλουν περιορισμούς αναφορικά με το μέγιστο επιτρεπόμενο χρονικό βήμα. Αυτό συνεπάγεται την αναγκαιότητα ενός μεγάλου αριθμού από μικρά χρονικά βήματα για την προσέγγιση της μόνιμης κατάστασης.

Στην πεπλεγμένη μέθοδο, οι τιμές των άγνωστων μεταβλητών τη νέα χρονική στιγμή δεν εμφανίζονται μόνο στον όρο της χρονικής παραγώγου αλλά και στους υπόλοιπους όρους των υπό μελέτη εξισώσεων. Ένα σύστημα από πεπλεγμένες εξισώσεις μπορεί να δημιουργεί ορισμένα υπολογιστικά προβλήματα, ωστόσο οι διακριτοποιημένες εξισώσεις δίνουν τελικώς ένα σύστημα που είναι πιο εύκολο να επιλυθεί. Έτσι, μπορούν να χρησιμοποιηθούν απλοί αλγόριθμοι για την επίλυση του συστήματος σε κάθε βήμα αν και οι αριθμητικές ενέργειες που απαιτούνται είναι πολύ περισσότερες σε σχέση με την ρητή μέθοδο. Αυτό βέβαια εξισορροπείται από το γεγονός ότι οι πεπλεγμένες μέθοδοι, τουλάχιστον για τα γραμμικά προβλήματα, δεν έχουν κανένα περιορισμό όσον αφορά το χρονικό βήμα και συνεπώς συνολικά απαιτείται μικρότερος αριθμός επαναλήψεων για την προσέγγιση της μόνιμης κατάστασης.

Η επίλυση του παραγόμενου σε κάθε περίπτωση αλγεβρικού συστήματος μπορεί γενικά να πραγματοποιηθεί με δύο τεχνικές: (i) την άμεση και (ii) την επαναληπτική μέθοδο. Η πρώτη χαρακτηρίζει την επίλυση ενός γραμμικού προβλήματος σε ένα βήμα, ενώ η δεύτερη απαιτεί πολλές επαναλήψεις. Επιπλέον, γίνεται αντιληπτό πως για τα μη-γραμμικά προβλήματα όλες οι προσεγγίσεις θα είναι απαραίτητα επαναληπτικές. Η σύγκλιση αυτών των επαναληπτικών σχημάτων αποτελεί αντικείμενο συζήτησης σε ποικίλες περιπτώσεις.

Όλα τα προαναφερόμενα στάδια μπορούν να αλληλεπιδράσουν μεταξύ τους. Έτσι οι τεχνικές επίλυσης των αλγεβρικών συστημάτων μπορούν να επηρεαστούν από τον τύπο της διακριτοποίησης αλλά και από τα χαρακτηριστικά της ροής. Ο εμπορικός κώδικας υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Fluent, που χρησιμοποιήθηκε, δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να επιλέξει μεταξύ ενός αριθμού σχημάτων διακριτοποίησης. Θεωρήθηκε λοιπόν σκόπιμο στο κεφάλαιο αυτό να γίνει μια περιληπτική σύνοψη, που επιτρέπει τον αναγνώστη να κατανοήσει τις βασικές έννοιες του τεράστιου και σύνθετου πεδίου της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, παρουσιάζοντας παράλληλα το υπόβαθρο για την επιλογή των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτή την εργασία (Clercq, 2003) & (Fluent, 1998).

6.2. Αριθμητικοί μέθοδοι επίλυσης

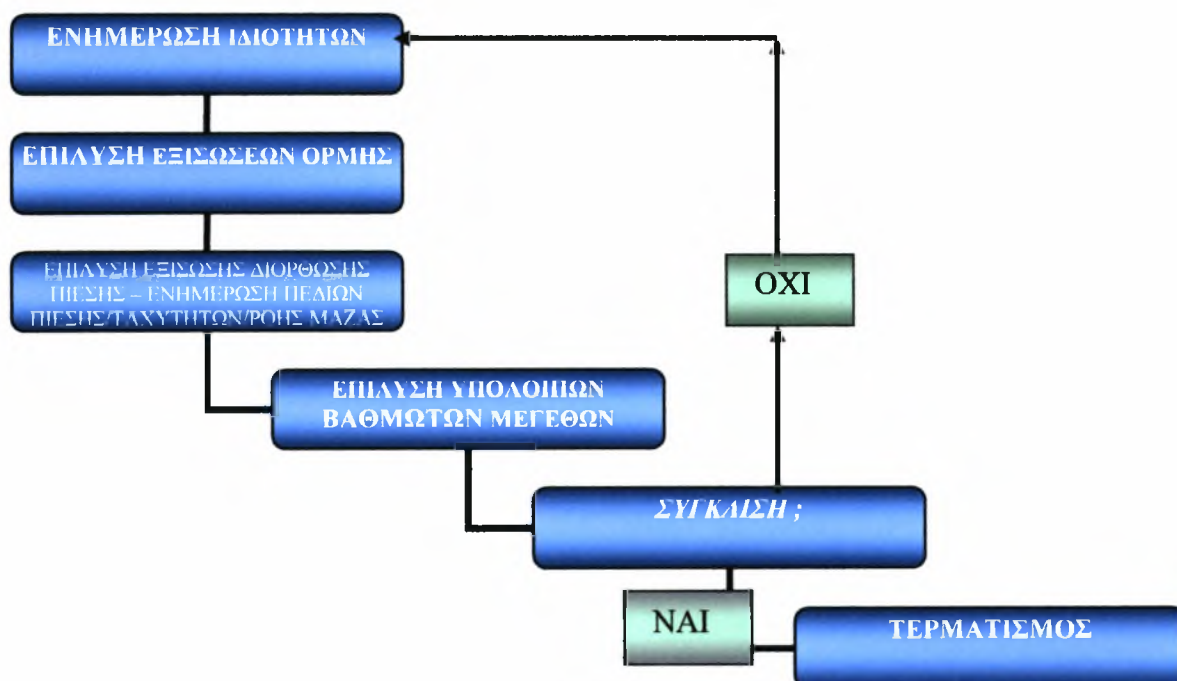
Το Fluent επιτρέπει την επιλογή μεταξύ των ακόλουθων αριθμητικών μεθόδων :

- Την αποσυζευκτική μέθοδο επίλυσης (segregated solution method)
- Την συζευγμένη μέθοδο επίλυσης (coupled solution method)

Και οι δύο προαναφερόμενοι επιλύτες χρησιμοποιούν την ίδια τεχνική διακριτοποίησης, βασισμένη σε όγκους ελέγχου, η οποία θα αναφερθεί αναλυτικά στη συνέχεια, ωστόσο διαφέρουν ως προς την προσέγγιση που χρησιμοποιείται για την γραμμικοποίηση και την επίλυση των διακριτοποιημένων εξισώσεων.

6.2.1. Αποσυζευκτική μέθοδος επίλυσης (segregated solution method)

Σε αυτή τη μέθοδο, οι θεμελιώδεις εξισώσεις επιλύονται διαδοχικά και ξεχωριστά η μία από την άλλη. Επειδή, οι εξισώσεις αυτές είναι μη γραμμικές, πρέπει να γίνουν αρκετές επαναλήψεις του βρόγχου επίλυσης (που απεικονίζεται στο Σχήμα 6.1), για να επιτευχθεί η σύγκλιση.



Σχήμα 6.1: Λογικό διάγραμμα αλγόριθμου αποσυζευγμένης επίλυσης (Fluent, 1998)

Έτσι σε κάθε επανάληψη εκτελούνται τα παρακάτω βήματα (*Fluent, 1998*):

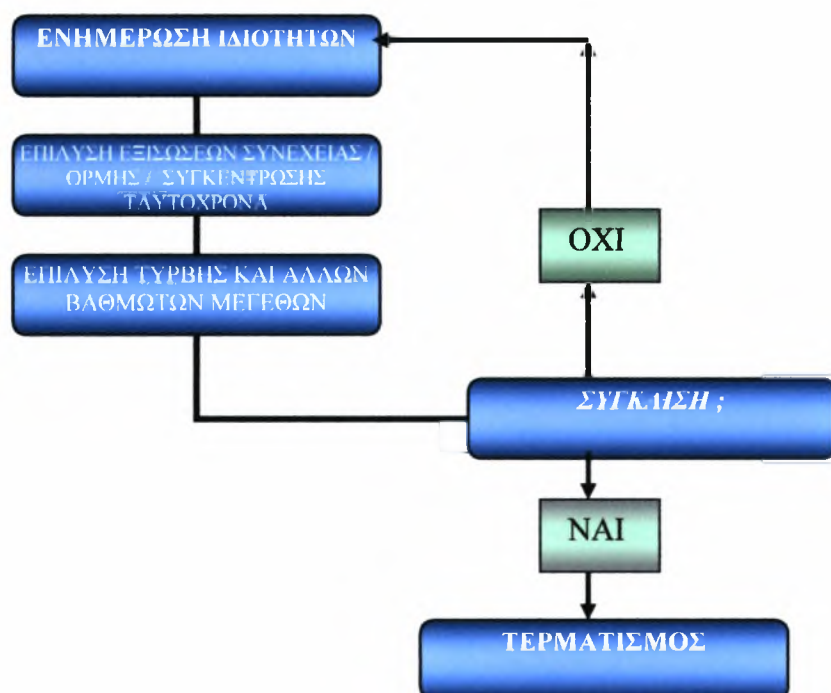
1. Ενημερώνονται οι ιδιότητες των ρευστών, από την τρέχουσα λύση. (Σε περίπτωση που οι υπολογισμοί μόλις έχουν ξεκινήσει, οι ιδιότητες ενημερώνονται από τις αρχικές τιμές).
2. Επιλύονται οι x, y, z εξισώσεις ορμής, κατά σειρά, χρησιμοποιώντας τις τρέχουσες τιμές για την πίεση και για τη ροή μαζών, με αντικειμενικό σκοπό την ενημέρωση (νέα λύση) του πεδίου ταχυτήτων.
3. Εάν οι τιμές που προκύπτουν από το Βήμα 2 δεν ικανοποιούν την εξίσωση συνέχειας τοπικά, τότε παράγεται μια εξίσωση τύπου Poisson (εξίσωση διόρθωσης πίεσης) από την εξίσωση της συνέχειας και τις γραμμικοποιημένες εξισώσεις ορμής. Αυτή η εξίσωση διόρθωσης πίεσης επιλύεται στη συνέχεια για να διορθώσει τα πεδία πιέσεων και ταχυτήτων ώστε να ικανοποιείται τοπικά η εξίσωση της συνέχειας.
4. Όπου απαιτείται, επιλύονται οι εξισώσεις των υπόλοιπων βαθμωτών μεγεθών (π.χ. τύρβης, ενέργειας, συγκεντρώσεις) χρησιμοποιώντας τις τιμές των προηγούμενων βημάτων για τα υπόλοιπα μεγέθη.
5. Τα Βήματα 1 έως 5 επαναλαμβάνονται, μέχρι να επιτευχθούν τα επιθυμητά επίπεδα σύγκλισης.

6.2.2. Συζευγμένη μέθοδος επίλυσης (coupled solution method)

Στη μέθοδο αυτή, οι θεμελιώδεις εξισώσεις συνέχειας, ορμής και (όπου απαιτείται) ενέργειας και μεταφοράς ουσιών, επιλύονται ταυτόχρονα (συζευγμένα). Οι επιπλέον εξισώσεις άλλων βαθμωτών μεγεθών επιλύονται διαδοχικά (ξεχωριστά η μια από την άλλη και ξεχωριστά από τις συζευγμένες εξισώσεις) χρησιμοποιώντας την διαδικασία που χρησιμοποιείται στην αποσυζευτική μέθοδο επίλυσης που περιγράφηκε παραπάνω. Εξαιτίας της μη γραμμικότητας των θεμελιωδών εξισώσεων αλλά και εξαιτίας της σύζευξης αυτών, απαιτείται η εκτέλεση αρκετών επαναλήψεων του βρόγχου επίλυσης πριν επιτευχθεί μια συγκλίνουσα λύση. Κάθε επανάληψη απαρτίζεται από τα βήματα που αναφέρονται στη συνέχεια και απεικονίζονται στο Σχήμα 6.2 (*Fluent, 1998*):

1. Ενημερώνονται οι ιδιότητες των ρευστών, από την τρέχουσα λύση. (Σε περίπτωση που οι υπολογισμοί μόλις έχουν ξεκινήσει, οι ιδιότητες ενημερώνονται από τις αρχικές τιμές).

2. Οι θεμελιώδεις εξισώσεις συνέχειας, ορμής και (όπου απαιτείται) ενέργειας και μεταφοράς ουσιών, επιλύονται ταυτόχρονα (συζευγμένα).
3. Όπου απαιτείται, επιλύονται οι εξισώσεις των υπόλοιπων βαθμωτών μεγεθών (π.χ. τύρβης) χρησιμοποιώντας τις τιμές από τα προηγούμενα βήματα για τα υπόλοιπα μεγέθη.
4. Τα Βήματα 1 έως 4 επαναλαμβάνονται, μέχρι να επιτευχθούν τα επιθυμητά επίπεδα σύγκλισης.



Σχήμα 6.2: Λογικό διάγραμμα αλγόριθμου συζευγμένης επίλυσης (Fluent, 1998)

6.3. Τεχνικές διακριτοποίησης

Στο σημείο αυτό θα περιγραφούν οι εξής τρεις διαθέσιμες τεχνικές διακριτοποίησης:

- Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών (Finite Difference Method, FDM)
- Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method, FEM)
- Μέθοδος πεπερασμένων όγκων (Finite Volume Method, FVM)

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών διακριτοποιεί τις παραγώγους των μερικών διαφορικών εξισώσεων κάνοντας χρήση του αναπτύγματος Taylor, ενώ η πιο γενική μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων προσεγγίζει τις άγνωστες μεταβλητές μέσω γραμμικών

συνδυασμών απλών συναρτήσεων. Η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων βασίζεται στην ολοκλήρωση των θεμελιωδών εξισώσεων, για κάθε όγκο ελέγχου, παράγοντας την διακριτή εξίσωση διατήρησης κάθε ποσότητας. Εξαιτίας της ευρείας αποδοχής και εφαρμογής της (τεχνική που εφαρμόζει και το Fluent) συζητείται σε μεγαλύτερη έκταση από τις άλλες δύο μεθόδους.

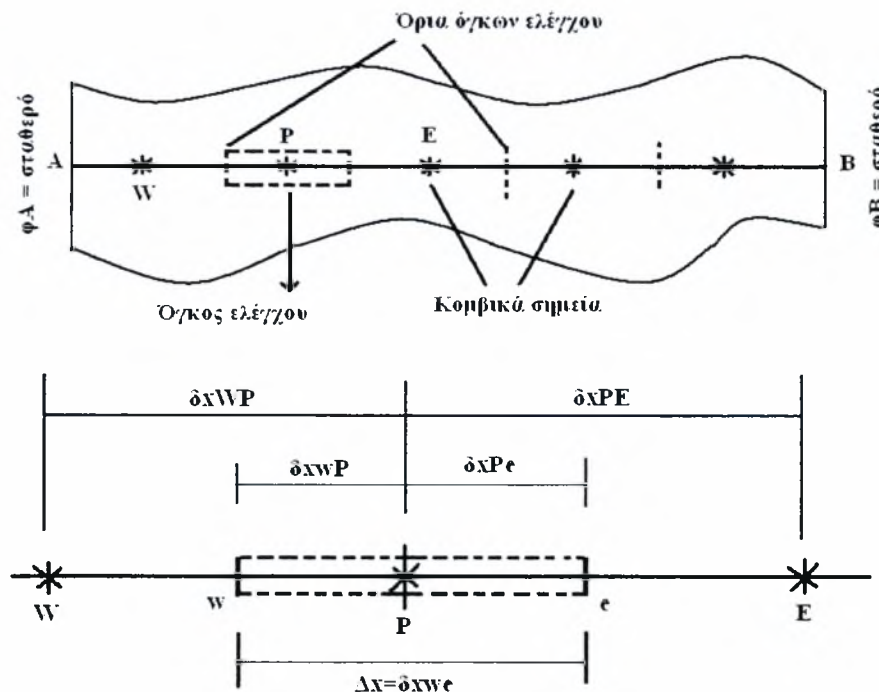
6.3.1 Μέθοδος πεπερασμένων όγκων (finite volume method, FVM)

Η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων διακριτοποιεί απευθείας την ολοκληρωτική μορφή των θεμελιωδών εξισώσεων στο φυσικό χώρο. Η μέθοδος αυτή μπορεί να εναλλακτικά να χαρακτηριστεί ως μέθοδος πεπερασμένης διαφοράς, που εφαρμόζεται στη διαφορική μορφή των θεμελιωδών εξισώσεων, γραμμένων σε αυθαίρετες συντεταγμένες ή ως μια τροποποιημένη έκφραση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων. Εντούτοις, εξαιτίας της σημαντικότητας και της ευρείας αποδοχής της σε μεγάλο αριθμό εφαρμογών, παρουσιάζεται εδώ ξεχωριστά. Επιπροσθέτως, η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται από τον εμπορικό κώδικα Fluent και συνεπώς χρησιμοποιήθηκε και στην συγκεκριμένη μελέτη (Clercq, 2003).

Γενικά

Η διακριτοποίηση των εξισώσεων με την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων αναλύεται εκτενώς από το Patankar και παρουσιάζεται εδώ εν συντομία. Αρχικά το χωρίο επίλυσης υποδιαιρείται σε πεπερασμένο αριθμό όγκων ελέγχου, οι οποίοι αναλαμβάνουν τον ρόλο των υπολογιστικών κελιών. Στην περίπτωση εφαρμογής ομόθετου πλέγματος μόνο μια ομάδα κελιών απαιτείται για τον υπολογισμό της ροής, ενώ στην περίπτωση μετατοπισμένου πλέγματος απαιτούνται 3 ή 4 ομάδες όγκων ελέγχου (για διδιάστατες και τρισδιάστατες ροές, αντίστοιχα). Στην πρώτη περίπτωση τα υπολογιστικά σημεία είναι σημεία αποθήκευσης όλων των μεταβλητών και τοποθετούνται στο κέντρο των υπολογιστικών όγκων, ενώ στην δεύτερη η κατάσταση διαφοροποιείται για τις ομάδες των όγκων ελέγχου των ταχυτήτων. Οι υπολογιστικοί όγκοι ελέγχου για την εξίσωση της συνέχειας είναι όμοιοι με την πρώτη περίπτωση. Τα υπολογιστικά κύτταρα των ταχυτήτων U , V και W μετατοπίζονται κατά την διανυσματική τους διεύθυνση και η αποθήκευση τους γίνεται στο κέντρο των (πλευρών ή των επιφανειών) των όγκων ελέγχου της συνέχειας. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων ορμής επί των αντιστοίχων όγκων ελέγχου οδηγεί στην παραγωγή εξισώσεων διατήρησης ορμής για κάθε υπολογιστικό όγκο.

Όπως προαναφέρθηκε το πρώτο βήμα στην τεχνική των πεπερασμένων όγκων είναι ο επιμερισμός του πεδίου σε διακριτούς όγκους ελέγχου. Ας θεωρήσουμε λοιπόν πως εισάγουμε ένα αριθμό από κομβικά σημεία μεταξύ του A και του B (Σχήμα 6.3). Τα όρια (ή πλευρές) των όγκων ελέγχου τοποθετούνται στο μεσοδιάστημα μεταξύ γειτονικών κόμβων. Έτσι, κάθε κόμβος περικλείεται από ένα όγκο ελέγχου ή κελί. Αποτελεί γενικά κοινή πρακτική οι όγκοι ελέγχου να τοποθετούνται κοντά στα άκρα του πεδίου με τέτοιο τρόπο ώστε τα φυσικά όρια να συμπίπτουν με τα όρια των όγκων ελέγχου. Στο σημείο αυτό κρίνεται σκόπιμο να παρουσιάσουμε ένα σύστημα συμβολισμών που χρησιμοποιείται και στη συνέχεια. Για μια μονοδιάστατη γεωμετρία, ένα γενικό κομβικό σημείο ορίζεται ως P , ενώ τα γειτονικά σημεία ανατολικά και δυτικά του αυτού, ορίζονται ως E και W , αντίστοιχα. Η δυτική πλευρά του όγκου ελέγχου συμβολίζεται ως w και η ανατολική πλευρά του όγκου ελέγχου ως e . Οι αποστάσεις μεταξύ των κόμβων W και P και μεταξύ των P και E ορίζονται ως δx_{WP} και δx_{PE} , αντίστοιχα. Όμοια οι αποστάσεις μεταξύ της πλευράς του όγκου ελέγχου w και του κόμβου P και μεταξύ του κόμβου P και της πλευράς e ορίζονται ως δx_{wP} και δx_{Pe} , αντίστοιχα. Επιπλέον όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.3, το συνολικό πλάτος του όγκου ελέγχου είναι $\Delta x = \delta x_{we}$.



Σχήμα 6.3: Επεξήγηση των συμβολισμών της τεχνικής των πεπερασμένων όγκων για μονοδιάστατη γεωμετρία (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Στην περίπτωση δύο διαστάσεων εισάγονται άλλοι δύο γειτονικοί κόμβοι ως προς τον κόμβο P , βόρεια (N) και νότια (S) αυτού (δες Σχήμα 6.5), ενώ για τις τρεις διαστάσεις ο κόμβος P έχει έξι γειτονικούς κόμβους (δυτικά W , ανατολικά E , βόρεια N , νότια S , επάνω T και κάτω B) όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχήμα 6.4 (Versteeg & Malalasekera, 1995).

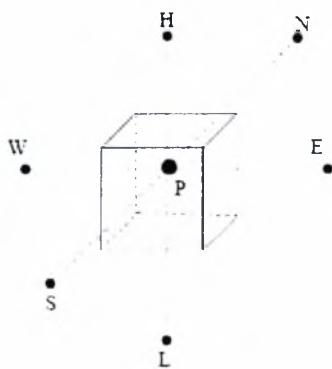
Όλες οι εξισώσεις διατήρησης μπορούν να εκφραστούν γενικά, ως εξής:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho U_i \phi - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) = S_{\phi} \quad (6.1)$$

Με ολοκλήρωση της εξίσωσης (6.1) στο υπολογιστικό όγκο του Σχήματος 6.5 παράγεται η διακριτοποιημένη εξίσωση για το μέγεθος ϕ , η οποία λαμβάνει την ακόλουθη μορφή για μόνιμη ροή:

$$J_t - J_b + J_n - J_s + J_e - J_w + D_t - D_b + D_n - D_s + D_e - D_w = S_P \quad (6.2)$$

όπου S_P είναι ο όρος πηγής του όγκου ελέγχου P , και J_f και D_f είναι οι ροές συναγωγής και διάχυσης της μεταβλητής ϕ στην επιφάνεια f ($f=t, b, n, s, e, w$)



Σχήμα 6.4: Τυπικός υπολογιστικός όγκος τρισδιάστατου υπολογιστικού πεδίου

Οι ροές λόγω συναγωγής υπολογίζονται ως εξής:

$$J_f = C_f \phi_f \quad (6.3)$$

όπου C_f είναι ο ρυθμός ροής μάζας που διέρχεται από την επιφάνεια f και ϕ_f είναι η μεταβλητή που μεταφέρεται και συνδέεται με το ρυθμό ροής μάζας και η οποία συνήθως αποθηκεύεται στο κέντρο του κελιού, και κατά συνέπεια κάποιο σχήμα παρεμβολής πρέπει

να υποθεθεί για να προσδιοριστεί η τιμή της σε κάθε επιφάνεια του όγκου ελέγχου. Η διαδικασία παρεμβολής που χρησιμοποιείται για αυτή την λειτουργία υπόκειται σε διάφορα σχήματα που έχουν προταθεί, με αποτέλεσμα η ακρίβεια και η ευστάθεια της λύσης να εξαρτάται από επιλογή της παρεμβολής.

Γενικά, η τιμή της ϕ_f μπορεί σχηματιστεί ρητά με όρους από του γειτονικούς κόμβους με σχέσεις συναρτήσεων του τύπου:

$$\phi_f = P(\phi_{nb}) \quad (6.4)$$

όπου ϕ_{nb} υποδηλώνει τις τιμές του ϕ στους γειτονικούς κόμβους.

Με συνδυασμό των εξισώσεων (6.3) και (6.4) η (6.2) τροποποιείται στην ακόλουθη μορφή:

$$\{D_t - C_t[P(\phi_{nb})]_t\} - \{D_b - C_b[P(\phi_{nb})]_b\} + \{D_n - C_n[P(\phi_{nb})]_n\} - \{D_s - C_s[P(\phi_{nb})]_s\} + \{D_e - C_e[P(\phi_{nb})]_e\} - \{D_w - C_w[P(\phi_{nb})]_w\} = S_p \quad (6.5)$$

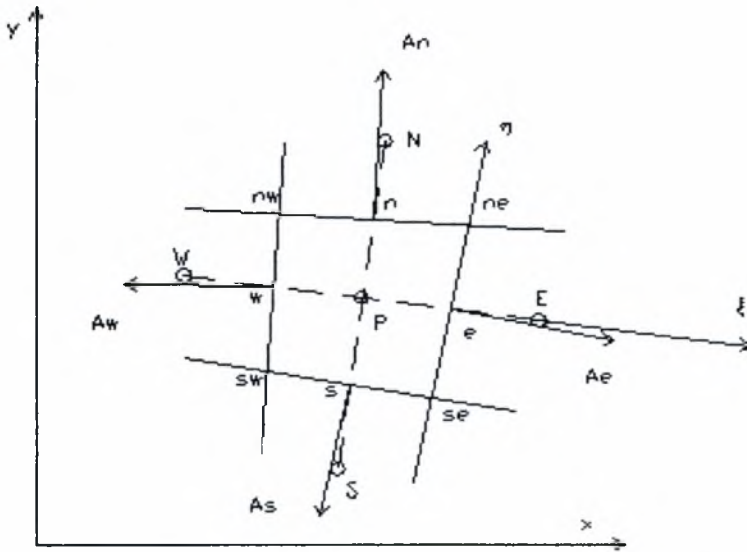
Γενικά στοιχεία χωρικής διακριτοποίησης

Στη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων χρησιμοποιείται η ολοκληρωτική μορφή των θεμελιωδών διαφορικών εξισώσεων που διέπουν τη ροή. Δηλαδή η μορφή:

$$\int_S \rho \phi \vec{u} \cdot \vec{n} dS = \int_S \Gamma \text{grad} \phi \cdot \vec{n} dS + \int_{\Omega} q_{\phi} d\Omega \quad (6.6)$$

Από την παραπάνω εξίσωση λείπει ο μεταβατικός όρος σε σχέση με την (6.1). Κάθε φορά που μια λύση είναι έτοιμη χρησιμοποιείται σαν αρχική τιμή της επόμενης χρονικής στιγμής. Δηλαδή στο πεδίο του χρόνου το πρόβλημα είναι παραβολικού τύπου και ορίζεται από τις αρχικές τιμές.

Το πεδίο ροής διαμερίζεται σε πεπερασμένο αριθμό μικρών όγκων ελέγχου (που στην περίπτωση των δύο διαστάσεων φυσικά πρόκειται για εμβαδά), από ένα πλέγμα το οποίο καθορίζει τα όρια κάθε όγκου ελέγχου. Στο Σχήμα 6.5 εμφανίζεται όγκος ελέγχου με την ονοματολογία που χρησιμοποιείται.



Σχήμα 6.5: Διδιάστατος όγκος ελέγχου και ονοματοθεσία

Η λογική που χρησιμοποιείται σε αυτή τη μέθοδο είναι η ακόλουθη : Αν θεωρηθεί ποσότητα f τότε το επικαμπύλιο ολοκλήρωμά της είναι το αλγεβρικό άθροισμα των ποσοτήτων f που διαπερνούν τα όρια του όγκου ελέγχου που περικλείει η καμπύλη.

Έτσι στη γενική περίπτωση ισχύει:

$$\int_S \bar{f} dS = \sum_k \bar{f}_k \bullet \bar{A}_k, \quad k=e,w,s,n \quad (6.7)$$

όπου \bar{f}_k η τιμή της μεταβλητής f (που στη γενική περίπτωση θεωρείται άνυσμα) πάνω στην επιφάνεια k , και \bar{A}_k διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια.

Δεδομένου ότι οι εξισώσεις που περιγράφουν τη ροή στην ολοκληρωτική τους μορφή αποτελούνται από επικαμπύλια και χωρικά ολοκληρώματα και εφόσον τα χωρικά ολοκληρώματα είναι δυνατόν να μετατραπούν σε επικαμπύλια με τη βοήθεια του θεωρήματος Gauss, είναι δυνατόν να αντικατασταθούν τα ολοκληρώματα με αθροίσματα και κατά αυτόν τον τρόπο να επιτευχθεί ο σκοπός μας που ήταν η μετατροπή του συστήματος των μερικών διαφορικών εξισώσεων σε σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων.

Η διακριτοποίηση του όρου μεταφοράς για τον οποίο ισχύει $\vec{f} = \rho \vec{u} \varphi$ θα δώσει:

$$I_e c = F_{|e} \phi_e \quad (6.8)$$

$$I_n C = F_{2n} \phi_n \quad (6.9)$$

όπου φ_e και φ_n οι τιμές της μεταβλητής φ στις επιφάνειες east και north αντίστοιχα.

Η διακριτοποίηση του όρου διάχυσης για των οποίο ισχύει $\vec{f} = \Gamma \text{grad}\varphi$ θα δώσει:

$$I_e d = -\Gamma_{\phi,e} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \vec{j} \right)_e \cdot \vec{A}_e \quad (6.10)$$

$$I_n d = -\Gamma_{\phi,n} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \vec{j} \right)_n \cdot \vec{A}_n \quad (6.11)$$

Στην περίπτωση του καμπυλόγραμμου συστήματος είναι σημαντικό να σημειωθεί εδώ ότι:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right) \text{ και } \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right) \quad (6.12)$$

όπου (ξ, η) το τοπικό σύστημα συντεταγμένων όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.5 και J η Ιακωβιανή του μετασχηματισμού.

Η διακριτοποίηση του όρου πηγής q_φ συνήθως μας δίνει μια τιμή στο υπολογιστικό σημείο P στο κέντρο δηλαδή του όγκου ελέγχου (Pantakar, 1980). Συχνά δίνεται ως άθροισμα δύο όρων, τεχνική γνωστή ως γραμμικοποίηση του όρου πηγής.

$$S_\varphi = SP_\varphi + SU_\varphi \varphi_P \quad (6.13)$$

Με αυτόν τον τρόπο κάθε εξίσωση παίρνει τελικά μια μορφή του τύπου:

$$a_P \varphi_P = \sum_{nb} a_{nb} \varphi_{nb} + S_\varphi \quad (6.14)$$

όπου nb δηλώνει τους γειτονικούς κόμβους (neighboring nodes). Για την ευστάθεια της επαναληπτικής μεθόδου είναι αρκετό να ισχύει $|a_P| \geq \sum_{nb} |a_{nb}|$, το αν θα συμβεί αυτό εξαρτάται από την τεχνική παρεμβολής που θα χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των τιμών των μεταβλητών πάνω στις επιφάνειες των όγκων ελέγχου.

Προκειμένου να εξασφαλιστεί η σύγκλιση ανεξαρτήτως μεθόδου παρεμβολής εφαρμόζεται η τεχνική της υποχαλάρωσης. Η μεταβολή της εξαρτημένης μεταβλητής από τη μια εξωτερική επανάληψη στην επόμενη πολλαπλασιάζεται με έναν συντελεστή υποχαλάρωσης a_ϕ .

$$\phi_p^n = \phi_p^o + a_\phi \left(\frac{\sum_{nb} \alpha_{nb} \phi_{nb} + S_\phi}{\alpha_p} - \phi_p^o \right) \quad (6.15)$$

και έτσι η τελική μορφή της διακριτοποιημένης και γραμμικοποιημένης ολοκληρωτικής εξίσωσης παίρνει τη μορφή:

$$\frac{\alpha_p}{a_\phi} \phi_p = \sum_{nb} \alpha_{nb} \phi_{nb} + S_\phi + \frac{1 - a_\phi}{a_\phi} \alpha_p \phi_p^o \quad (6.16)$$

όπου τα (n) και (o) σημαίνουν νέες και παλιές τιμές.

6.4. Σχήματα διακριτοποίησης

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφονται τα σχήματα διακριτοποίησης των όρων συναγωγής στις διακριτοποιημένες εξισώσεις πεπερασμένων όγκων. Η ακρίβεια, η αριθμητική ευστάθεια και η φραγή της υπολογιστικής λύσης εξαρτάται ισχυρά από το αριθμητικό σχήμα αυτών των όρων. Το βασικό κλειδί είναι ο καθορισμός της κατάλληλης συνδετικής σχέσης μεταξύ της μεταβλητής που συνάγεται (μεταφέρεται), η οποία αποθηκεύεται στο κέντρο του κελιού, και της τιμής αυτής σε κάθε μια από τις επιφάνειες του κελιού.

Όπως έχει αναφερθεί οι τιμές των μεταβλητών αποθηκεύονται μεν στο κέντρο του όγκου ελέγχου χρησιμοποιούνται όμως και στις επιφάνειές του. Έτσι είναι κρίσιμης σημασίας το πως θα υπολογιστούν οι τιμές των μεταβλητών πάνω στις επιφάνειες αυτές. Οι δύο βασικοί και παλαιότεροι τρόποι παρεμβολής είναι η παρεμβολή ανάντη (Upwind Differencing Scheme – UDS) και η παρεμβολή κεντρικής διαφοράς (Central Differencing Scheme – CDS).

Επειδή η μεν πρώτη είναι 1^{ης} τάξης ακρίβειας, τάξη που δεν είναι ικανοποιητική για ισχυρά ελλειπτικούς υπολογισμούς, η δε δεύτερη είναι μεν μεγαλύτερης τάξης ακρίβειας δίνει όμως ασταθές αριθμητικό σχήμα, που αρκετές φορές οδηγεί σε μη φυσιολογικά αποτελέσματα, κρίνεται απαραίτητη η ενσωμάτωση σχημάτων διακριτοποίησης υψηλότερης

ακρίβειας, για να ανταποκριθούν στον ελλειπτικό χαρακτήρα των ροών με ισχυρές ογκομετρικές και μη δυνάμεις, οι οποίες δημιουργούν απότομες κλίσεις και πιθανές ασυνέχειες στο υπολογιστικό πεδίο, που στην καλύτερη περίπτωση οδηγούν σε κακές εκτιμήσεις (Φεΐδαρος, 2006).

6.4.1. Ιδιότητες σχημάτων διακριτοποίησης

Στην υπολογιστική ρευστοδυναμική τα σχήματα διακριτοποίησης πρέπει να έχουν συγκεκριμένες βασικές ιδιότητες για να παράγουν φυσικά ρεαλιστικά αποτελέσματα. Αυτές οι ιδιότητες είναι οι η διατηρησιμότητα (conservation), η περιοριστικότητα (boundedness), η μεταφορικότητα (transportiveness) και η ακρίβεια (accuracy).

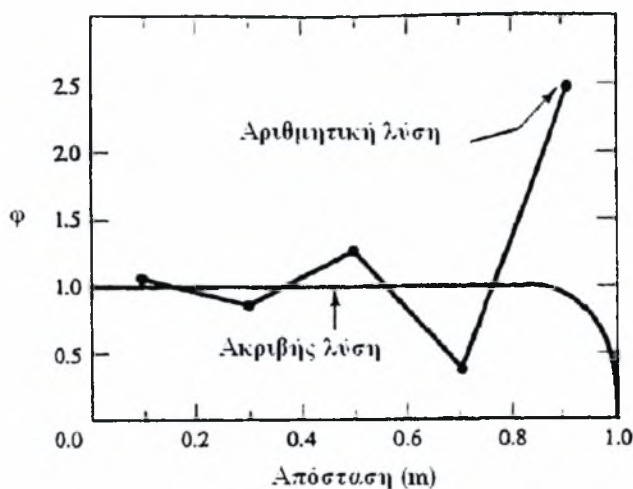
Διατηρησιμότητα (Conservation)

Αυτή η ιδιότητα διασφαλίζει την ολική διατήρηση των ιδιοτήτων του ρευστού για το συνολικό υπολογιστικό πεδίο. Πιο αναλυτικά, η ολοκλήρωση της θεμελιώδους εξίσωσης συναγωγής – διάχυσης, για ένα πεπερασμένο αριθμό όγκων ελέγχου, παράγει ένα σετ από διακριτοποιημένες θεμελιώδεις εξισώσεις, που εμπεριέχουν τις ροές (fluxes) της μεταφερόμενης ιδιότητας ϕ , στις επιφάνειες των όγκων ελέγχου. Για να διασφαλιστεί η διατήρηση της ϕ σε όλο το υπολογιστικό πεδίο, πρέπει η ροή (flux) της ϕ που εγκαταλείπει τον όγκο ελέγχου διαμέσου μιας επιφάνειας να ισούται με τη ροή της ϕ που εισέρχεται στο γειτονικό όγκο ελέγχου μέσω της ίδιας επιφάνειας. Είναι πολύ σημαντική ιδιότητα και επιτυγχάνεται μέσω συνεπών εκφράσεων (μία και όμοια έκφραση) για τις ροές (fluxes) των μεταβλητών επίλυσης διαμέσου των επιφανειών γειτονικών όγκων ελέγχου. Αυτό είναι σημαντικό ζήτημα όταν χρησιμοποιούνται διάφορα σχήματα για την διακριτοποίηση των όρων συναγωγής. (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Περιοριστικότητα (Boundedness)

Η ιδιότητα της περιοριστικότητας είναι συναφής με την ευστάθεια και απαιτεί σε προβλήματα χωρίς πηγές να φράσσεται η λύση από μέγιστες και ελάχιστες συνοριακές τιμές των μεταβλητών της ροής. Δηλαδή, εάν οι συνοριακές τιμές μιας μεταβλητής σε ένα πρόβλημα κυμαίνονται μεταξύ 200 και 500, τότε οι εσωτερικές τιμές δεν πρέπει να είναι ποτέ μικρότερες από 200 και μεγαλύτερες από 500.

Μια άλλη ιδιότητα της περιοριστικότητας είναι η απαίτηση όλοι οι συντελεστές των διακριτοποιημένων εξισώσεων να έχουν το ίδιο πρόσημο (συνήθως όλα θετικά). Αυτό συνεπάγεται πως μια αύξηση της τιμής μιας μεταβλητής σε οποιονδήποτε κόμβο προκαλεί επίσης αύξηση της τιμής της εν λόγω μεταβλητής και στους γειτονικούς κόμβους. Εάν το σχήμα διακριτοποίησης δεν ικανοποιεί το κριτήριο της περιοριστικότητας, είναι πιθανόν να μην υπάρξει καθόλου σύγκλιση της λύσης ή ακόμη και αν υπάρξει εμπεριέχει σημαντική παλινδρόμηση (wiggles). Μια τέτοια περίπτωση παλινδρόμησης, για ένα πρόβλημα συναγωγής – διάχυσης σε ένα μονοδιάστατο πεδίο παρουσιάζεται στο Σχήμα 6.6 (Versteeg & Malalasekera, 1995).



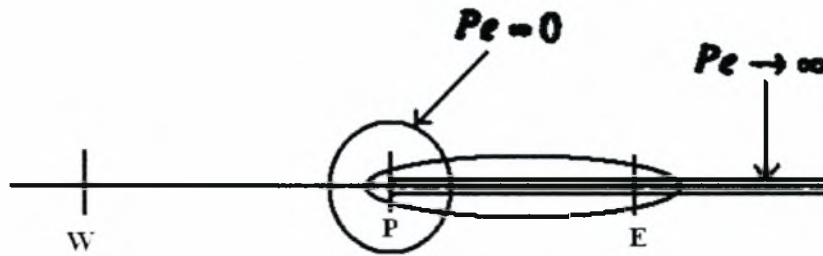
Σχήμα 6.6 : Παράδειγμα παλινδρόμησης (wiggles) σε ένα πρόβλημα συναγωγής-διάχυσης, για μονοδιάστατο πεδίο με αριθμός $Pe = 5$ (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Για τη διατήρηση θετικής τιμής για όλους τους συντελεστές των διακριτοποιημένων εξισώσεων απαιτείται ένας κατάλληλος ρυθμός ροής διάχυσης. Ως κανόνας χρησιμοποιείται ο λόγος του ρυθμού ροής συναγωγής προς το ρυθμό ροής διάχυσης, γνωστός και ως αριθμός Peclet (Pe), ο οποίος πρέπει να είναι μικρότερος του 2. Στο Σχήμα 6.6 ο αριθμός $Pe=5$, γεγονός που εξηγεί την παλινδρομική λύση (Clercq, 2003).

Μεταφορικότητα (Transportiveness)

Μια ροή συνδυάζει δράσεις συναγωγής και διάχυσης. Ας υποθέσουμε μια σταθερή πηγή σε ένα σημείο P, Σχήμα 6.7 και ας ορίσουμε τον αδιάστατο αριθμό Pe που από φυσικής απόψεως εκφράζει τη σχετική ένταση της συναγωγής ως προς τη διάχυση. Ας εξετάσουμε τώρα τον βαθμό επίδρασης του ανάντη κόμβου P στον κατάντη κόμβο E, για δύο ακραίες

περιπτώσεις: (i) καθόλου συναγωγή και καθαρή διάχυση ($Pe = 0$) και (ii) καθόλου διάχυση και καθαρή συναγωγή ($Pe \rightarrow \infty$).



Σχήμα 6.7: Κατανομή της ποσότητας της μεταβλητής ϕ γύρω από μια πηγή, για διαφορετικούς αριθμούς Peclet (Pe), (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Στην περίπτωση της καθαρής διάχυσης ($Pe = 0$), το υγρό είναι σταθερό και οι ροϊκές γραμμές της ϕ θα είναι ομόκεντροι κύκλοι με κέντρο το P, διότι η διάχυση τείνει να απλώσει το ϕ ομοιόμορφα προς όλες τις κατευθύνσεις. Συνεπώς οι συνθήκες στο ανατολικό κόμβο E θα επηρεάζονται από τις συνθήκες που επικρατούν στον κόμβο P καθώς και από τις συνθήκες που επικρατούν σε ακόμη προγενέστερους κόμβους. Καθώς ο αριθμός Pe αυξάνει οι ροϊκές γραμμές αλλάζουν σχήμα από κυκλικό σε ελλειπτικό και μετατοπίζονται προς τη διεύθυνση της ροής. Η επίδραση γίνεται ραγδαία διαφορετική προς την αντίθετη διεύθυνση της ροής, για μεγάλες τιμές του αριθμού Pe , με αποτέλεσμα ο κόμβος E να επηρεάζεται έντονα από τον κόμβο P, αλλά οι ιδιότητες του κόμβου P ελάχιστα επηρεάζονται από το E.

Στην περίπτωση καθαρής συναγωγής ($Pe \rightarrow \infty$), οι ελλειπτικές ροϊκές γραμμές απλώνονται προς τη διεύθυνση της ροής. Όλες οι ιδιότητες που απορρέουν από την πηγή P μεταφέρονται απευθείας στον κατάντη κόμβο E. Η τιμή λοιπόν της ϕ στον κόμβο E επηρεάζεται μόνο από τις ανάντη συνθήκες και καθώς δεν υπάρχει καθόλου διάχυση, ισχύει $\phi_E = \phi_P$.

Η ιδιότητα αυτή είναι το μέτρο της ικανότητας του σχήματος να αναγνωρίζει την διεύθυνση της ροής και ορίζεται όπως είδαμε από τον τοπικό αριθμό Peclet. Η ιδιότητα αυτή αφορά αποκλειστικά τους όρους συναγωγής (Versteeg & Malalasekera, 1995).

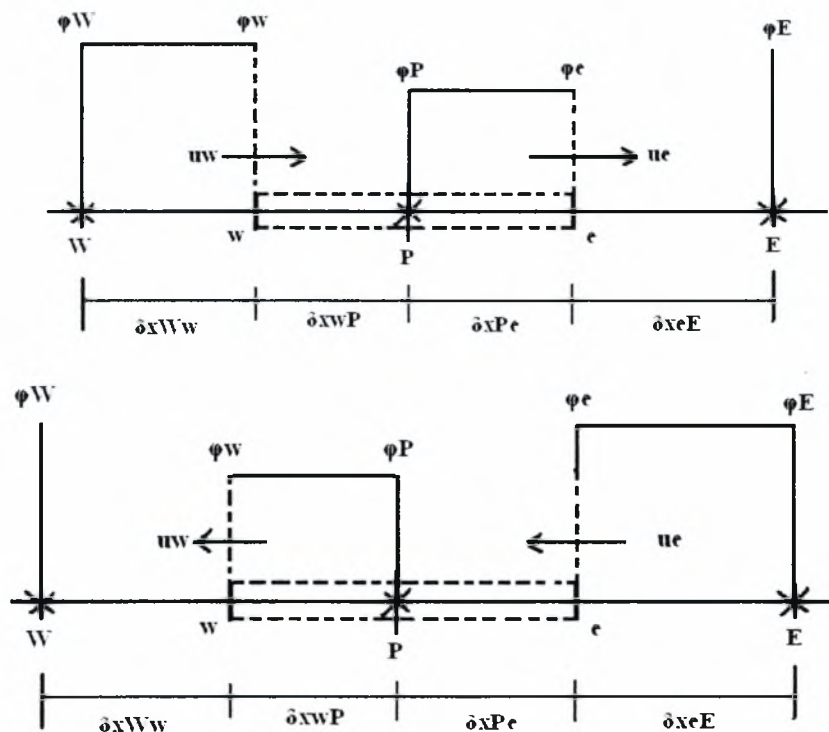
Ακρίβεια (Accuracy)

Κλασικά, η ακρίβεια και κατ' επέκταση η τάξη του σχήματος με την οποία προσεγγίζονται οι όροι συναγωγής και διάχυσης, κρίνεται από τους όρους αποκοπής του αναπτύγματος της σειράς Taylor. Παρόλα αυτά, πρέπει να σημειωθεί ότι άλλα

χαρακτηριστικά των σχημάτων διακριτοποίησης κάνουν την εκτίμηση της ακρίβειας περισσότερο σύνθετη (Φεΐδαρος, 2006).

6.4.2. Απλό σχήμα ανάντη διακριτοποίησης - UDS

Είναι ο πιο απλός τρόπος παρεμβολής. Στο Σχήμα 6.8 παρουσιάζονται οι τιμές των κόμβων που χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των τιμών στις επιφάνειες, όταν η ροή ακολουθεί την θετική κατεύθυνση (δυτικά προς ανατολικά) και όταν η ροή ακολουθεί την αντίθετη πορεία (ανατολικά προς δυτικά) (Versteeg and Malalasekera, 1995) & (Spalding, 1972).



Σχήμα 6.8 : Τιμές των κόμβων για ροή προς τη θετική κατεύθυνση (δυτικά προς ανατολικά) και για ροή προς την αρνητική διεύθυνση (ανατολικά προς δυτικά), (Versteeg & Malalasekera, 1995)

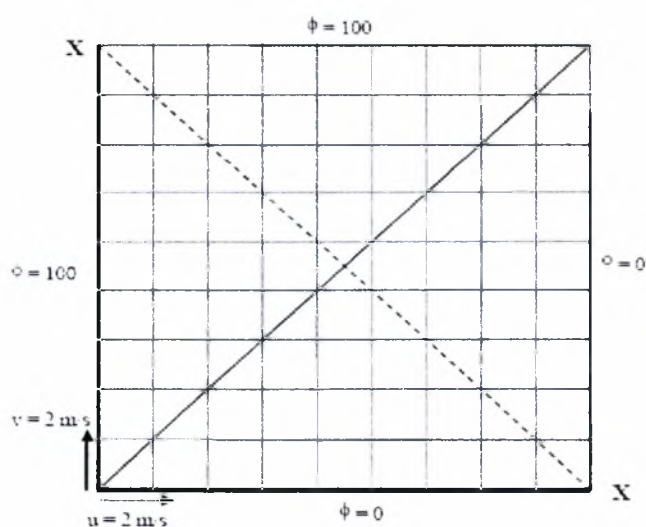
Η τιμή στην επιφάνεια ισούται με την τιμή του τελευταίου υπολογιστικού σημείου (κέντρου του όγκου ελέγχου) το οποίο εγκατέλειψε το ρευστό, δηλαδή:

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_P & \text{αν } F_{I_e} > 0 \\ \varphi_E & \text{αν } F_{I_e} < 0 \end{cases} \quad (6.17)$$

Είναι σχήμα 1^{ης} τάξης ακρίβειας και ως μέθοδος παρεμβολής ικανοποιεί τα κριτήρια ευστάθειας άνευ όρων. Όμως προκαλεί αριθμητική διάχυση (δηλαδή αυξάνει τεχνητά τον όρο Γ_e και προκαλεί διάχυση κάθετα στην κατεύθυνση της ροής) (Φείδαρος, 2006) & (Fluent, 1998).

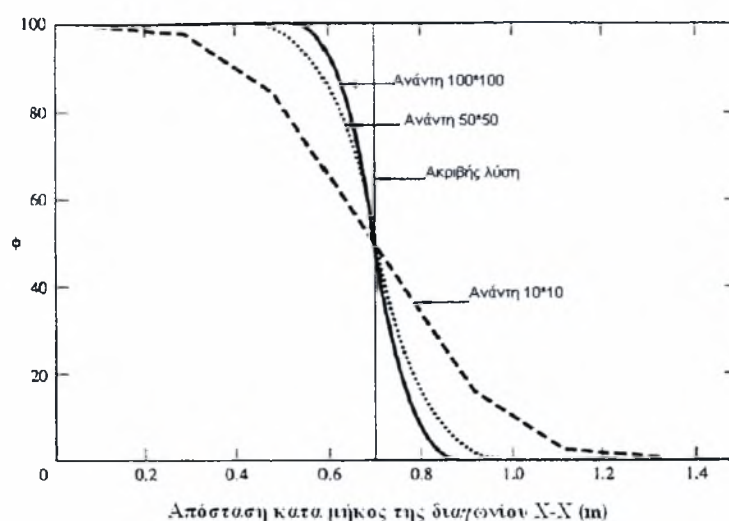
Πιο αναλυτικά, εξαιτίας της απλότητάς του, το εν λόγω σχήμα έχει χρησιμοποιηθεί σε πολλές εφαρμογές υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, ενώ μπορεί εύκολα να επεκταθεί σε πολυδιάστατες ροές. Το βασικό μειονέκτημα αυτού είναι η πρόκληση εσφαλμένων αποτελεσμάτων όταν η ροή δεν ευθυγραμμίζεται με τις γραμμές του πλέγματος. Σε τέτοιου είδους ροές το ανάντη διαφορικό σχήμα προκαλεί τυχαία διανομή των μεταφερόμενων ιδιοτήτων. Το σφάλμα αυτό χαρακτηρίζεται ως αριθμητική διάχυση διότι παρουσιάζει μια μορφή διάχυσης. Για την κατανόηση και απεικόνιση της επίδρασης της αριθμητικής διάχυσης, ας θεωρήσουμε ότι η μεταφορά μιας βαθμωτής ιδιότητας ϕ περιγράφεται από ένα ανάντη πρώτης τάξης σχήμα σε ένα πεδίο στο οποίο η ροή σχηματίζει μια γωνία ως προς ένα καρτεσιανό πλέγμα.

Έτσι, για παράδειγμα το πεδίο του Σχήματος 6.9 ορίζεται παντού με $u = v = 2 \text{ m/s}$ ώστε το πεδίο ταχύτητας να είναι ομοιόμορφο και παράλληλο στη διαγώνιο κατά μήκος του πλέγματος. Οι οριακές συνθήκες της ϕ είναι μηδέν στο δυτικό και ανατολικό όριο και 100 στο νότιο και βόριο όριο. Καθώς η ροή είναι παράλληλη στη διαγώνιο (συνεχής γραμμή του σχήματος 6.9), αναμένεται όλες οι τιμές της ποσότητας ϕ να είναι 100 πάνω από τη διαγώνιο και μηδέν κάτω από αυτή. Καθώς δεν υπάρχει καθόλου φυσική διάχυση η ακριβής λύση επιδεικνύει μια βηματική μεταβολή του ϕ από το 100 έως το 0 όταν η διαγώνιος X-X τέμνει τη συνεχή διαγώνιο.



Σχήμα 6.9: Παράδειγμα αριθμητικής (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Στο Σχήμα 6.10 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για διαφορετικές αναλύσεις πλέγματος μαζί με την ακριβή λύση. Τα αριθμητικά αποτελέσματα δείχνουν κακό προφίλ. Για το συγκεκριμένο παράδειγμα η αύξηση της ανάλυσης του πλέγματος (πυκνό πλέγμα) υπερνικά το περιγραφέν πρόβλημα της αριθμητικής διάχυσης. Ωστόσο, σε πρακτικές ροές, η εξαιρετική ανάλυση του πλέγματος θα κόστιζε εξαιρετικά από υπολογιστικής άποψης. Για το λόγο αυτό κρίνεται επιβεβλημένη η χρήση σχημάτων υψηλότερης ακρίβειας (Versteeg & Malalasekera, 1995).



Σχήμα 6.10: Παράδειγμα αριθμητικής διάχυσης – αριθμητική λύση (Versteeg & Malalasekera, 1995)

6.4.3. Σχήμα διακριτοποίησης Power Law

Το σχήμα Power Law διακριτοποίησης προτάθηκε από τον Patankar (1980) και παρέχει μια πιο ακριβή προσέγγιση της μονοδιάστατης λύσης της εξίσωσης συναγωγής-διάχυσης και παράγει καλύτερης ποιότητας αποτελέσματα από το υβριδικό σχήμα. Σε αυτό το σχήμα η διάχυση μηδενίζεται όταν ο αριθμός Pe υπερβαίνει την τιμή 10. Ο αριθμός Pe από φυσικής απόψεως εκφράζει τη σχετική ένταση της συναγωγής ως προς τη διάχυση. Μεγάλος αριθμός Peclet σημαίνει ότι η μεταφορά της ϕ με συναγωγή είναι πιο σημαντική από εκείνη λόγω διάχυσης και ότι η ανάντη είναι η πιο πιθανή μεταφερόμενη τιμή της ϕ .

Εάν ισχύει $0 < Pe < 10$, η ροή της ποσότητας ϕ που συνάγεται, υπολογίζεται με την χρήση πολυωνυμικής σχέσης. Για παράδειγμα, η καθαρή ροή του μεγέθους ϕ ανά μονάδα επιφανείας στην επιφάνεια του δυτικού όγκου ελέγχου, υπολογίζεται ως εξής:

$$q_w = F_w [\varphi_w - \beta_w (\varphi_p - \varphi_w)] \quad \text{για } 0 < Pe < 10 \quad (6.18)$$

όπου $\beta_w = (1.0 - 0.1 Pe_w)^5 / Pe_w$ και

$$q_w = F_w \varphi_w \quad \text{για } Pe > 10 \quad (6.19)$$

οπότε οι συνδυαστικοί συντελεστές που σχηματίζονται για μονοδιάστατη εξίσωση συναγωγής – διάχυσης θα είναι:

$$a_E = D_e \max[0, (1 - 0.1 |Pe_e|)^5] + \max[-F_e, 0] \quad (6.20)$$

$$a_w = D_w \max[0, (1 - 0.1 |Pe_w|)^5] + \max[-F_w, 0] \quad (6.21)$$

$$a_p = a_E + a_w + (F_e - F_w) \quad (6.22)$$

Οι ιδιότητες του σχήματος Power Law είναι παρόμοιες με αυτές του υβριδικού, με το πρώτο να είναι πιο ακριβές καθώς προσπαθεί να αποδώσει την λύση πιο πειστικά. Το σχήμα αυτό αποδείχθηκε αρκετά χρήσιμο σε πρακτικές εφαρμογές και μπορεί να είναι εναλλακτικό του υβριδικού σχήματος (Versteeg & Malalasekera, 1995).

Συγκεκριμένα έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς για τη διακριτοποίηση των εξισώσεων ροής σε δεξαμενές καθίζησης (Zhou et al., 1992, Imam et al., 1983, McCorquodale & Zhou, 1993 κ.α.).

6.4.4. Σχήμα διακριτοποίησης κεντρικών διαφορών - CDS

Πρόκειται για την απλή γραμμική παρεμβολή (Versteeg & Malalasekera, 1995), (Spalding, 1972) & (Ferziger, 2001). Η τιμή στην επιφάνεια είναι η γραμμική παρεμβολή ανάμεσα στις τιμές των όγκων ελέγχου που διαχωρίζει η επιφάνεια αυτή.

$$\phi_e = \phi_E f_{x,p} + \phi_P (1 - f_{x,p}) \quad (6.23)$$

όπου ο συντελεστής παρεμβολής $f_{x,p}$ υπολογίζεται:

$$f_{x,p} = \frac{\overline{Pe}}{\overline{Pe} + eE} \quad (6.24)$$

είναι 2^{ης} τάξης ακριβείας, μπορεί όμως να προκαλέσει ταλάντωση στην επαναληπτική

διαδικασία και να οδηγήσει σε αφύσικες λύσεις όταν ο τοπικός αριθμός $|Pe| > 2$ (Φείδαρος, 2006).

Εξάγεται λοιπόν το συμπέρασμα ότι το σχήμα κεντρικών διαφορών μπορεί να προκαλέσει μη οριοθετημένες λύσεις και επιπλέον αφύσικες παλινδρομήσεις (δες Σχήμα 6.6), γεγονός που συνεπάγεται προβλήματα σταθερότητας για την αριθμητική διαδικασία. Για την παράκαμψη αυτού του προβλήματος σταθερότητας μπορεί να γίνει μια διαφορετική προσέγγιση και να γίνει μίξη δύο σχημάτων (του εν λόγω σχήματος κεντρικών διαφορών και του απλού ανάντη σχήματος) (Fluent, 1998).

Με βάση την τεχνική αυτή, που χρησιμοποιείται για να μειώσει τον αριθμό των υπολογισμών που προκύπτουν όταν έχουμε σχήματα υψηλότερης τάξης από την πρώτη, προκύπτει:

$$\varphi_e = \varphi_e^{UDS} + \beta(\varphi_e^{CDS} - \varphi_e^{UDS}) \quad (6.25)$$

όπου β είναι ο συντελεστής ανάμιξης των δύο σχημάτων ($0 \leq \beta \leq 1$) και ο παράγοντας β καθορίζεται εξωτερικά και ενιαία για όλο το πεδίο ροής. Το ποιο σχήμα θα πρέπει τελικά να χρησιμοποιηθεί εξαρτάται από τη φύση του προβλήματος. Γενικά συνιστάται η ανάντη παρεμβολή αν η μεταφορά είναι πιο ισχυρή από τη διάχυση (Φείδαρος, 2006).

Ανακεφαλαιώνοντας είναι ξεκάθαρο πως η εφαρμογή του σχήματος κεντρικών διαφορών για τους όρους συναγωγής και διάχυσης διακατέχεται από σημαντικά προβλήματα. Αρχικά, ο αριθμός Pe πρέπει να έχει μικρές τιμές ώστε να προκύψει μια σταθερή, δευτέρας τάξεως ακριβής λύση. Κατά δεύτερον, το εν λόγω σχήμα λαμβάνει υπόψη τις επιδράσεις από όλες τις κατευθύνσεις για τον υπολογισμό του flux της συναγωγής, με αποτέλεσμα να αδυνατεί να κατανοήσει την κατεύθυνση της ροής. Εξαιτίας αυτών των περιορισμών το σχήμα κεντρικών διαφορών δεν είναι κατάλληλο ως σχήμα διακριτοποίησης ανεξαιρέτως σε όλα τα προβλήματα ροής και ως εκ τούτου κρίνεται αναγκαία η ενσωμάτωση σχημάτων διακριτοποίησης υψηλότερης ακρίβειας (Clercq, 2003).

6.4.5. Σχήμα υβριδικής ανάντη διακριτοποίησης - HDS

Το σχήμα αυτό που παρουσιάστηκε από τον Spalding (1972) αποτελεί συνδυασμό του απλού ανάντη σχήματος και του σχήματος των κεντρικών διαφορών. Έτσι, η τιμή της

μεταβλητής πάνω στην επιφάνεια του όγκου ελέγχου εξαρτάται από τον αριθμό Peclet ο οποίος μας δίνει ένα μέτρο για το πόσο σημαντικότερη είναι η επίδραση της συναγωγής από τη διάχυση σε μια διεργασία. Συγκεκριμένα :

$$Pe = \frac{\text{convection}}{\text{diffusion}} = \frac{F_i}{D_i} \quad (6.26)$$

Αν ο αριθμός Pe έχει μεγάλη τιμή τότε κυριαρχεί η συναγωγή και είναι ασφαλές να υπολογιστεί η τιμή στην επιφάνεια με ανάντη παρεμβολή. Εάν όμως ο αριθμός Pe είναι μικρός τότε η διάχυση είναι σημαντική σε σχέση με τη συναγωγή και η τιμή της μεταβλητής πάνω στην επιφάνεια του εμβαδού ελέγχου είναι καλύτερα να προσεγγιστεί με κεντρική διαφορά.

Για ομοιόμορφα πλέγματα ως μέτρο σύγκρισης της τιμής του αριθμού Pe προκειμένου να χαρακτηριστεί η ροή ως εξαρτώμενη από τη συναγωγή ή τη διάχυση είναι η τιμή 2.

Για μη-ομοιόμορφα πλέγματα είναι η τιμή που προκύπτει από το γεωμετρικό συντελεστή $1/(1-f_i)$. Έτσι η τιμή πάνω στην επιφάνεια east δίνεται:

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_P, & \frac{F_e}{D_e} > \frac{1}{1-f_e} \\ f_e \varphi_E + (1-f_e) \varphi_P, & -\frac{1}{1-f_e} < \frac{F_e}{D_e} < \frac{1}{1-f_e} \\ \varphi_E, & \frac{F_e}{D_e} < -\frac{1}{1-f_e} \end{cases} \quad (6.27)$$

Η υβριδική ανάντη είναι παρεμβολή με ακρίβεια 1^{ης} τάξης (Versteeg & Malalasekera, 1995), (Spalding, 1972) & (Ferziger, 2001).

6.4.6. Σχήμα διακριτοποίησης ανάντη δευτέρας τάξης (SOU)

Για το συγκεκριμένο σχήμα η τιμή του μεγέθους φ στις επιφάνειες του υπολογιστικού όγκου προσεγγίζεται από παρεμβολή δευτέρας τάξης. Για την ανατολική επιφάνεια του κελιού το μέγεθος φ εκτιμάται ως εξής (Warning and Beam, 1976), (Hodge et al., 1979), (Tamamidis and Assanis, 1993) & (Tompson and Wilkes, 1982) :

$$\phi_e \approx \begin{cases} \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_W, & \forall F_e > 0 \\ \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_{EE}, & \forall F_e < 0 \end{cases} \quad (6.28)$$

Θεωρώντας απλό ομοιόμορφο πλέγμα με σταθερό Δx , οι συνδυαστικοί συντελεστές της μονοδιάστατης διακριτοποιημένης εξίσωσης μεταφοράς θα είναι:

$$a_E = D_e + \frac{3}{2}\max[-F_e, 0] + \frac{1}{2}\max[-F_w, 0] \quad (6.29)$$

$$a_W = D_w + \frac{3}{2}\max[-F_w, 0] + \frac{1}{2}\max[-F_e, 0] \quad (6.30)$$

$$ST = a_{WW} + a_{EE} \quad (6.31)$$

$$a_P = a_E + a_W + SP + (F_e - F_w) \quad (6.32)$$

Η εφαρμογή του παραπάνω σχήματος σε μια, δύο ή και τρεις διαστάσεις εμπλέκει περισσότερα από 3(1Δ), 5(2Δ) και 9(3Δ) σημεία. Για την ακρίβεια τα σημεία που πιθανώς μπορεί να χρειαστούν είναι 5, 9 και 13, αντίστοιχα, και εμπλοκή αυτών των σημείων γίνεται με την χρήση της ύστερης διόρθωσης (Φεΐδαρος, 2006).

6.4.7. Σχήμα διακριτοποίησης QUICK

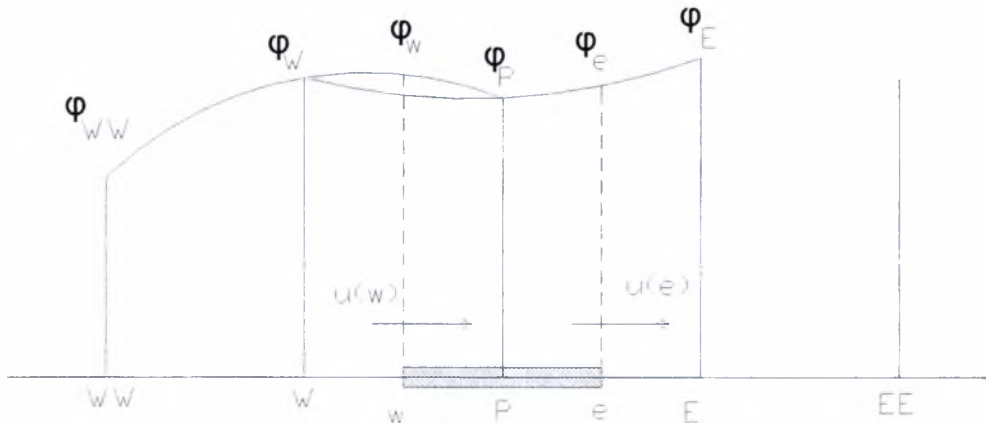
Τα σχήματα παρεμβολής που παρουσιάστηκαν μέχρι τώρα δεν είναι ικανοποιητικής ακρίβειας και γι' αυτό αναζητήθηκε ένα σχήμα παρεμβολής μεγαλύτερης τάξης ακρίβειας. Αυτό έγινε εφικτό με την εμφάνιση του σχήματος QUICK (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics) το οποίο χρησιμοποιεί ανάντη τετραγωνική παρεμβολή τριών σημείων για να υπολογίσει την τιμή της μεταβλητής στην επιφάνεια του όγκου ελέγχου (Versteeg & Malalasekera, 1995), (Hayase et al., 1992) & (Rahman et al., 1996).

Με άλλα λόγια, η εφαρμογή του σχήματος QUICK είναι εφικτή σε τετραεδρικά και εξαεδρικά πλέγματα, όπου μπορούν να αναγνωριστούν ανάντη και κατάντη επιφάνειες (έδρες), δίνοντας έτσι τη δυνατότητα υπολογισμού μιας υψηλότερης τάξης ακρίβειας των όρων συναγωγής για τη μεταβλητή ϕ . Τα σχήματα αυτού του τύπου βασίζονται στη σταθμική μέση τιμή των τιμών από το σχήμα δεύτερης τάξης και των κεντρικών παρεμβολών της μεταβλητής ϕ (Fluent, 1998).

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε το QUICK έτσι όπως δίνεται στις δημοσιεύσεις. Στο Σχήμα 6.11 παρουσιάζεται το σχήμα παρεμβολής σε μια διάσταση. Γενικά θεωρείται ότι η τιμή της μεταβλητής μεταβάλλεται τετραγωνικά από το ένα κέντρο του ενός υπολογιστικού όγκου στο άλλο, ακολουθώντας τη γενική μορφή :

$$\varphi(\xi, \eta)_P = C_1 + C_2 \xi + C_3 \xi^2 \quad (6.33)$$

Η τιμή των συντελεστών C_1 , C_2 και C_3 εξαρτάται από τη γεωμετρία του πλέγματος και από το πρόσημο της ροής της μάζας το οποίο θα καθορίσει ανάμεσα σε ποια εμβαδά ελέγχου θα γίνει η παρεμβολή. Το σχήμα QUICK είναι 3^{ης} τάξης ακρίβειας. Έχει όμως προβλήματα ευστάθειας ως σχήμα ανώτερης τάξης, τα οποία αρκετές φορές αντιμετωπίζονται με τεχνικές ύστερης διόρθωσης (deferred correction).



Σχήμα 6.11: Το σχήμα παρεμβολής QUICK σε μια διάσταση

Για σχήμα ανάντη τρίτης τάξης η τιμή ενός βαθμωτού μεγέθους στην ανατολική επιφάνεια ενός υπολογιστικού όγκου προσεγγίζεται από την σχέση:

$$\phi_e \approx \begin{cases} \frac{3}{8}\phi_E + \frac{3}{4}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_W, & F_e > 0 \\ \frac{3}{8}\phi_P + \frac{3}{4}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_{EE}, & F_e < 0 \end{cases} \quad (6.34)$$

Θεωρώντας απλό πλέγμα με σταθερά διαστήματα Δx , ο Leonard (Hayase et al., 1992) διαχώρισε την (6.34) σε ένα σχήμα κεντρικών διαφορών και μια διόρθωση τρίτης τάξης:

$$\phi_e \approx \begin{cases} \frac{1}{2}(\varphi_p + \varphi_E) - \frac{1}{8}(\varphi_W - 2\varphi_p + \varphi_E), & F_e > 0 \\ \frac{1}{2}(\varphi_p + \varphi_E) - \frac{1}{8}(\varphi_p - 2\varphi_E + \varphi_{EE}), & F_e < 0 \end{cases} \quad (6.35)$$

Όπως και στο δευτέρας τάξης σχήμα, έτσι και στο τρίτης τάξης αυξάνονται ο αριθμός των σημείων που εμπλέκονται στην παρεμβολή, δημιουργώντας αντίστοιχα προβλήματα με τα σχήματα δευτέρας τάξης (ταλαντωτική συμπεριφορά). Έχουν προταθεί αρκετές παραλλαγές ύστερης διόρθωσης (deferred correction), για το συγκεκριμένο σχήμα, τις οποίες συγκέντρωσαν οι Hayase et al. (1992), με σκοπό την συγκριτική αξιολόγηση και ανασκόπηση των παραλλαγών, αλλά και τη διατύπωση της δικής τους έκδοσης, η οποία είναι ένα σχήμα ανάντη τρίτης τάξης το οποίο δείχνει να συγκλίνει ταχύτερα ενώ είναι ευσταθές άνευ συνθήκης. (Φεΐδαρος, 2006)

Χρησιμοποιώντας εξαρτώμενη διόρθωση η εύρεση της τιμής ενός βαθμωτού μεγέθους στην επιφάνεια ενός όγκου ελέγχου, γίνεται με παρεμβολή των γειτονικών σημείων και με την προσθήκη ενός επιπλέον όρου πηγής από τις τιμές του ιδίου μεγέθους της προηγούμενης επανάληψης. Σύμφωνα την μέθοδο των Hayase et al. (1992), η γενική παρεμβολή QUICK στην ανατολική και δυτική πλευρά ενός κελιού έχει ως εξής :

$$\phi_e \approx \begin{cases} a_1\varphi_W + a_2\varphi_p + a_3\varphi_E + S_e^+, & F_e > 0 \\ b_1\varphi_W + b_2\varphi_p + b_3\varphi_E + S_e^-, & F_e < 0 \end{cases} \quad (6.36)$$

$$\phi_w \approx \begin{cases} b_1\varphi_W + b_2\varphi_p + b_3\varphi_E + S_w^+, & F_e > 0 \\ a_1\varphi_W + a_2\varphi_p + a_3\varphi_E + S_w^-, & F_e < 0 \end{cases} \quad (6.37)$$

όπου οι όροι πηγής S είναι:

$$\begin{aligned} S_e^+ &= \left(-\frac{1}{8} - a_1\right)\phi_W + \left(\frac{3}{4} - a_2\right)\phi_p + \left(\frac{3}{8} - a_3\right)\phi_E \\ S_e^- &= \left(-\frac{1}{8}\right)\phi_{EE} + \left(\frac{3}{4} - b_1\right)\phi_E + \left(\frac{3}{8} - b_2\right)\phi_p - b_3\phi_W \end{aligned} \quad (6.38)$$

και

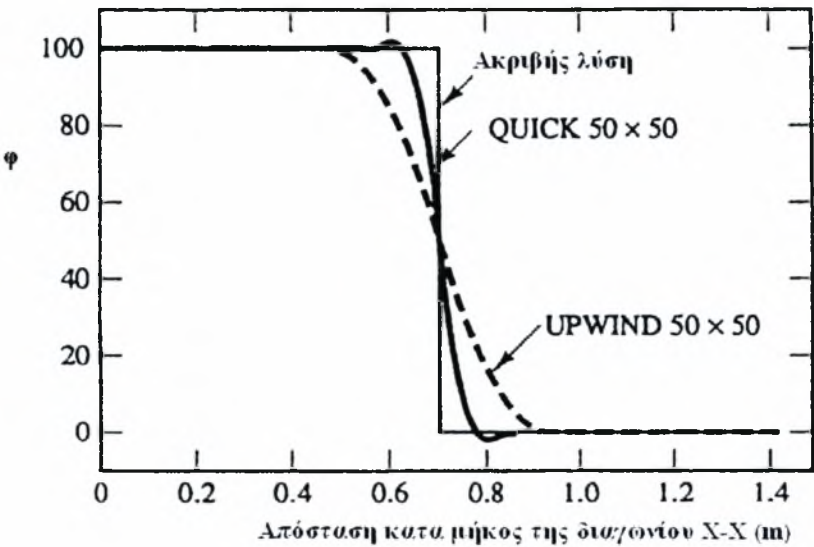
$$\begin{aligned} S_w^+ &= -\frac{1}{8}\phi_{EE} + \left(\frac{3}{4} - b_1\right)\phi_E + \left(\frac{3}{8} - b_2\right)\phi_p - b_3\phi_W \\ S_w^- &= \left(-\frac{1}{8} - a_1\right)\phi_E + \left(\frac{3}{4} - a_2\right)\phi_p + \left(\frac{3}{8} - a_3\right)\phi_W \end{aligned} \quad (6.39)$$

Πίνακας 6.1: Συντελεστές ύστερης διόρθωσης για γενικό σχήμα παρεμβολής QUICK

Συγγραφέας	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Leschziner (1980)	-1/8	6/8	3/8	6/8	3/8	0
Han et al., (1981)	0	6/8	4/8	4/8	3/8	0
Pollard et al., (1982)	-1/8	7/8	-6/8	6/8	-6/8	0
Freitas (1985)	-1/8	6/8	-1/8	6/8	3/8	0
Hayase (1992)	0	1	0	0	1	0

Το σχήμα QUICK είναι τυπικά πιο ακριβές σε δομημένα επιμήκη πλέγματα προς την κύρια διεύθυνση της ροής. Εδώ θα πρέπει να σημειωθεί ότι το σχήμα Quick μπορεί να εφαρμοστεί και σε μη δομημένα ή και σε υβριδικά πλέγματα με την ίδια επιτυχία με τα δομημένα. Σε αυτές τις περιπτώσεις στις επιφάνειες των μη – εξαεδρικών κελιών χρησιμοποιείται το ανάντη δευτέρας τάξεως σχήμα (*Fluent, 1998*).

Στο Σχήμα 6.12 που ακολουθεί, γίνεται μια σύγκριση του ανάντη πρώτης τάξεως σχήματος και του QUICK, για το διδιάστατο πρόβλημα που περιγράφηκε προηγουμένως (βλ. Σχήμα 6.10).



Σχήμα 6.12 : Παράδειγμα αριθμητικής διάχυσης – αριθμητική λύση. Σύγκριση ανάντη πρώτης τάξεως και QUICK (*Versteeg & Malalasekera, 1995*)

6.4.8. Σχήμα διακριτοποίησης MUSCL

Το σχήμα αυτό προέκυψε από το συνδυασμό του σχήματος κεντρικών διαφορών και του ανάντη δευτέρας τάξεως, ως εξής:

$$\phi_f = \theta \overline{\phi_f} + (1 - \theta) \phi_{f,SOU} \quad (6.40)$$

όπου $\overline{\phi_f}$ υπολογίζεται με παρεμβολή της τιμής του ϕ στο κέντρο της επιφάνειας, ενώ η τιμή $\phi_{f,SOU}$ υπολογίζεται όπως περιγράφηκε παραπάνω για το ανάντη δευτέρας τάξεως σχήμα διακριτοποίησης.

Αντίθετα από το σχήμα QUICK το οποίο όπως προαναφέραμε είναι δυνατή η εφαρμογή του σε τετραεδρικά και εξαεδρικά πλέγματα, όπου μπορούν να αναγνωριστούν ανάντη και κατάντη επιφάνειες (έδρες), το MUSCL (*Monotone Upstream – Centered Schemes for Conservation Laws*) βρίσκει εφαρμογή σε αυθαίρετα πλέγματα. Συγκρινόμενο τέλος με το ανάντη δευτέρας τάξεως σχήμα διακριτοποίησης, το τρίτης τάξεως σχήμα MUSCL, παρουσιάζει μια σημαντική βελτίωση της χωρικής ακρίβειας, για όλους τους τύπους πλέγματος, μειώνοντας σημαντικά την αριθμητική διάχυση, ιδιαίτερα στις περιπτώσεις σύνθετων τριδιάστατων ροών, ενώ είναι διαθέσιμο για όλες τις εξισώσεις μεταφοράς. (*Fluent user's guide, 1998*)

6.5. Υποχαλάρωση (Underrelaxation)

Εξαιτίας της μη γραμμικότητας των εξισώσεων που επιλύονται από το FLUENT, είναι απαραίτητος ο έλεγχος της αλλαγής της τιμής της μεταβλητής ϕ . Αυτό τυπικά επιτυγχάνεται με την υπο-χαλάρωση, η οποία μειώνει στην ουσία την αλλαγή που προκαλείται στην μεταβλητή ϕ κατά τη διάρκεια κάθε επανάληψης. Σε απλή μορφή η νέα τιμή της μεταβλητής ϕ , στο εσωτερικό ενός κελιού, εξαρτάται από την παλιά τιμή ϕ_{old} , την υπολογιζόμενη μεταβολή της ϕ , $\Delta\phi$, καθώς και το συντελεστή υποχαλάρωσης α , ως εξής (*Fluent, 1998*):

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta\phi \quad (6.41)$$

6.6. Αλγόριθμοι σύζευξης ορμής - πίεσης

Από τότε που προτάθηκε ο αλγόριθμός SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations) από τους Pantakar και Spalding (1972) (οι οποίοι βασίστηκαν στην μαθηματική διατύπωση του Chorin 1967), έχει εφαρμοστεί ευρέως σε πεδία υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και μετάδοσης θερμότητας. Τις τελευταίες τρεις δεκαετίες, έχουν

εμφανιστεί περί τις δέκα παραλλαγές του, που προτείνουν βελτιώσεις στην διαδικασία σύγκλισης. Αυτοί οι αλγόριθμοι αποτελούν την οικογένεια αλγόριθμων επίλυσης SIMPLE και είναι ευρύτατα διαδεδομένοι για την επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes για ασυμπίεστα ρευστά (παραλλαγές αυτών έχουν χρησιμοποιηθεί και για συμπιεστές ροές). Ανάμεσα στο σύνολο των παραλλαγών, οι γνωστοί και συχνά χρησιμοποιούμενοι αλγόριθμοι είναι οι SIMPLE, SIMPLE Revised (SIMPLER), SIMPLE Consistent (SIMPLEC) και ο SIMPLE eXtrapolation (SIMPLEX). Ο αλγόριθμος SIMPLEST είναι ουσιαστικά ίδιος με τον SIMPLE, με μόνη διαφορά στο σχήμα διακριτοποίησης των όρων συναγωγής, χωρίς να παρουσιάζει διαφορές στον τρόπο σύζευξης μεταξύ της ορμής και της πίεσης (Φείδαρος, 2006).

Στην συνέχεια γίνεται σύντομη περιγραφή των αλγορίθμων σύζευξης των εξισώσεων πίεσης ορμής για την περίπτωση μόνιμης διδιάστασης ροής ασυμπίεστου ρευστού με σταθερές ιδιότητες. Για λόγους απλότητας εξετάζονται μόνο οι διακριτοποιημένες εξισώσεις μάζας και ορμής. Επιπλέον, για την ανάδειξη κύριων χαρακτηριστικών των διαφορετικών αλγορίθμων η εξίσωση διόρθωσης πίεσης αναλύεται σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Για περιγραφή των αλγορίθμων υιοθετείται ο συμβολισμός Patankar (1981) που χρησιμοποιήθηκε για την περιγραφή του SIMPLE.

Οι διακριτοποιημένες εξισώσεις που διέπουν την παραπάνω ροή είναι :

Διατήρηση μάζας

$$(\rho u Dy)_e - (\rho u Dy)_w + (\rho v Dx)_n - (\rho v Dx)_s = 0 \quad (6.42)$$

Διατήρηση ορμής

$$a_e u_e = \sum a_{nb}^u u_{nb} + b^u + (p_P - p_E) A_e \quad (6.43)$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb}^v v_{nb} + b^v + (p_P - p_N) A_n \quad (6.44)$$

Η διαδικασία εξεύρεσης λύσης, εκκινεί από τυχαίο αρχικό πεδίο ταχυτήτων για να υπολογιστούν οι κεντρικοί συντελεστές (συναγωγής-διάχυσης) των εξισώσεων ορμής και από επίσης τυχαίο αρχικό πεδίο πιέσεων p^* για να επιλυθούν οι εξισώσεις ορμής και να ληφθούν οι προσωρινές ταχύτητες u^* και v^* οι οποίες δεν ικανοποιούν κατά ανάγκη την εξίσωση της συνέχειας. Οι προσωρινές ταχύτητες u^* και v^* διορθώνονται για να ικανοποιήσουν την διατήρηση της μάζας. Αυτό επιτυγχάνεται με την εξίσωση διόρθωσης πίεσης p' και από τις ταχύτητες u' και v' που αντιστοιχούν σε αυτή, και θα πρέπει να

προστεθούν στις αρχικές u^* και v^* . Η εύρεση των ταχυτήτων u^* και v^* γίνεται από τις εξισώσεις:

$$a_e u_e' = \sum a_{nb}^u u_{nb}' + b^u + (p_p' - p_E') A_e \quad (6.45\alpha)$$

$$a_n v_n' = \sum a_{nb}^v v_{nb}' + b^v + (p_p' - p_N') A_n \quad (6.45\beta)$$

Οι ταχύτητες u και v που ικανοποιούν και την εξίσωση της συνέχειας θα είναι $u = u^* + u'$ και $v = v^* + v'$, όπως επίσης και για την πίεση $p = p^* + p'$, οπότε οι εξισώσεις ορμής θα είναι:

$$a_e (u_e^* + u_e') = \sum a_{nb}^u (u_{nb}^* + u_{nb}') + b^u + ((p_p^* + p_p') - (p_E^* + p_E')) A_e \quad (6.46\alpha)$$

$$a_n (v_n^* + v_n') = \sum a_{nb}^v (v_{nb}^* + v_{nb}') + b^v + ((p_p^* + p_p') - (p_N^* + p_N')) A_n \quad (6.46\beta)$$

Με αφαίρεση κατά μέλη της (6.46) από την (6.45) προκύπτει:

$$a_e u_e' = \sum a_{nb}^u u_{nb}' + (p_p' - p_E') A_e \quad (6.47\alpha)$$

$$a_n v_n' = \sum a_{nb}^v v_{nb}' + (p_p' - p_N') A_n \quad (6.47\beta)$$

Οι εξισώσεις (6.47α και β) αναδεικνύουν ότι οι ταχύτητες διόρθωσης αποτελούνται από δύο όρους, ο ένας αντιστοιχεί στην διαφορά της διόρθωσης πίεσης μεταξύ δυο γειτονικών κελιών που βρίσκονται στην ίδια διεύθυνση με την ταχύτητα και ο άλλος προκαλείται από το σύνολο των γειτονικών κελιών. Ο πρώτος όρος αποτελεί την άμεση κινούσα δύναμη που επιφέρει την διόρθωση της ταχύτητας, ενώ ο δεύτερος είναι η έμμεση επιρροή της διόρθωσης πίεσης στα γειτονικά σημεία.

Η κύρια προσεγγιστική απλοποίηση που έγινε στον αλγόριθμο SIMPLE ήταν να αγνοηθεί η επιρροή των ταχυτήτων διόρθωσης από τα γειτονικά σημεία, θεωρώντας ότι $\sum a_{nb}^v v_{nb}' = \sum a_{nb}^u u_{nb}' = 0$, με αποτέλεσμα οι εξισώσεις (6.47 α,β) να γίνουν:

$$u_e' = \frac{A_e}{a_e} (p_p' - p_E') \xrightarrow{d_e = \frac{A_e}{a_e}} u_e' = d_e (p_p' - p_E') \quad (6.48\alpha)$$

$$v'_n = \frac{A_n}{a_n} (p'_P - p'_N) \xrightarrow{d_n = \frac{A_n}{a_n}} u'_n = d_n (p'_P - p'_N) \quad (6.48\beta)$$

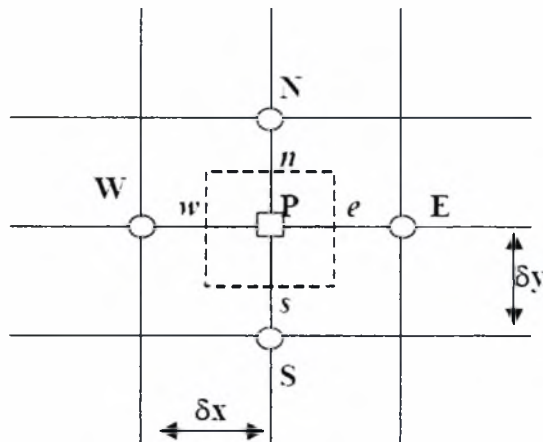
Οι εξισώσεις (6.48α,β) χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των διορθώσεων των ταχυτήτων στον αλγόριθμο SIMPLE, και οι τελικές ταχύτητες προκύπτουν από τις σχέσεις:

$$u = u^* + u' \Rightarrow u_e = u_e^* + d_e (p'_P - p'_E) \quad (6.49\alpha)$$

$$v = v^* + v' \Rightarrow v_n = v_n^* + d_n (p'_P - p'_N) \quad (6.49\beta)$$

οι οποίες λαμβάνονται σε κάθε επαναληπτική διαδικασία.

Μέχρι εδώ είδαμε τι συμβαίνει μόνο για της εξισώσεις ορμής, αλλά όπως προαναφέραμε το πεδίο ταχυτήτων υπόκειται στον περιορισμό ότι πρέπει να ικανοποιεί και την εξίσωση της συνέχειας. Η εξίσωση συνέχειας ικανοποιείται στη διακριτοποιημένη της μορφή, για τον βαθμωτό όγκο ελέγχου του Σχήματος 6.13.



Σχήμα 6.13 : Όγκος ελέγχου για ένα ομοιόμορφο πλέγμα (Versteeg & Malalasekera, 1995)

Πιο αναλυτικά, από την αντικατάσταση των διορθωμένων εξισώσεων των ταχυτήτων $u_e = u_e^* + d_e (p'_P - p'_E)$ και $v_n = v_n^* + d_n (p'_P - p'_N)$ στην εξίσωση της συνέχειας (6.42), προκύπτει η εξίσωση διόρθωσης της πίεσης, η τελική μορφή της οποίας είναι:

$$a_P p'_P = \sum a_{nb} p'_{nb} + b = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S \quad (6.50)$$

όπου:

$$a_E = \rho_e d_e \Delta y, a_W = \rho_w d_w \Delta y, a_N = \rho_n d_n \Delta x \text{ και } a_S = \rho_s d_s \Delta x,$$

ενώ ο όρος πηγής είναι :

$$b = (\rho u^* \Delta y)_e - (\rho u^* \Delta y)_w + (\rho v^* \Delta x)_n - (\rho v^* \Delta x)_s \quad (6.51)$$

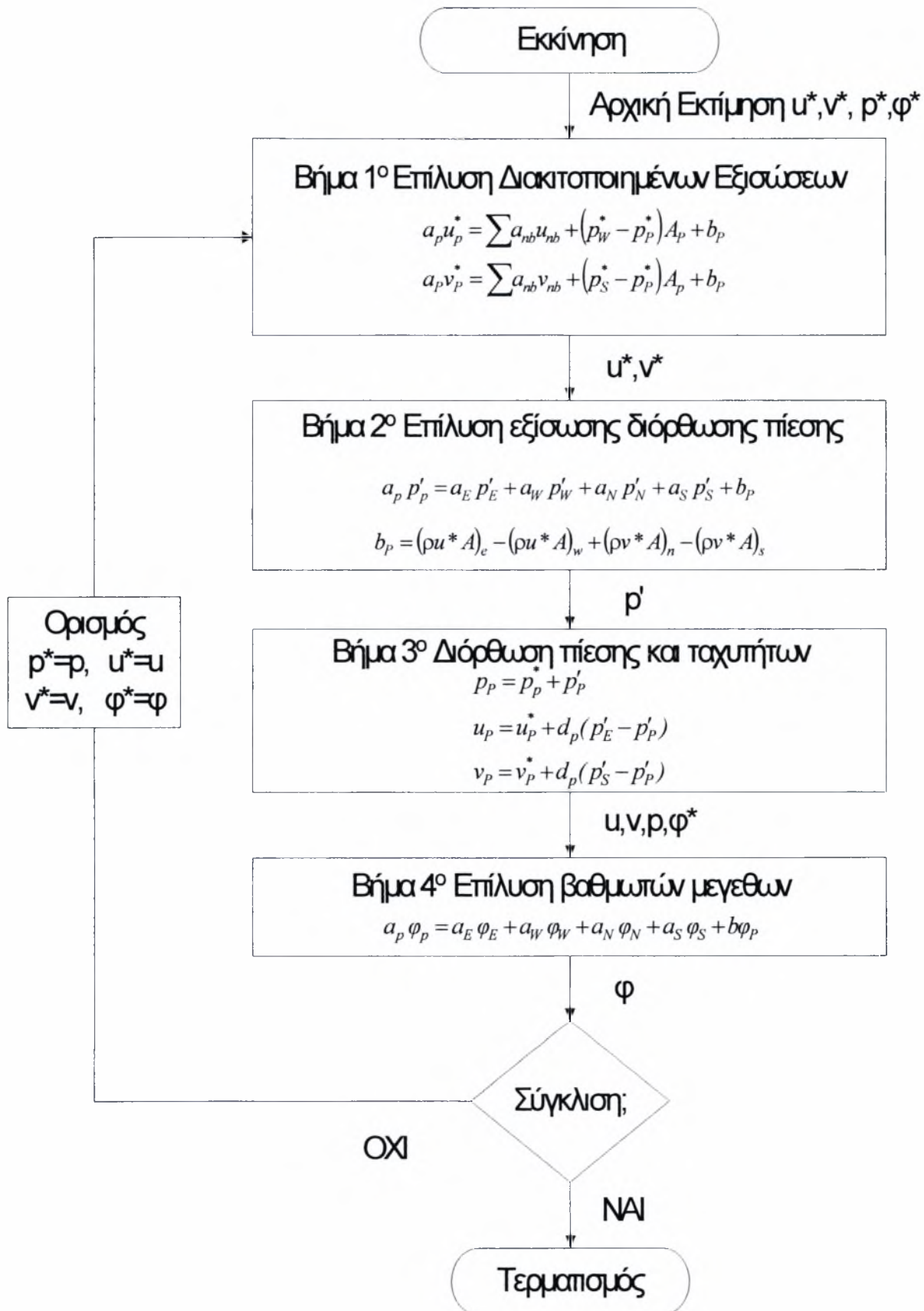
Στον αλγόριθμό SIMPLE απαιτείται υποχρεωτικά υποχαλάρωση για τον υπολογισμό της διόρθωσης πίεσης p' , καθώς η τιμή του p' υπερεκτιμάται, διότι δεν λαμβάνονται υπόψη οι γειτονικές συνεισφορές των εξισώσεων (6.47 α,β).

Η κύρια διαφοροποίηση μεταξύ των αλγορίθμων SIMPLEX και SIMPLE και των SIMPLEC και SIMPLE είναι ο προσδιορισμός των ποσοτήτων d_e , d_w , d_n και d_s . Οι Van Doormaal & Raithby (1984) υπολόγισαν τους παραπάνω συντελεστές λαμβάνοντας υπόψη την συνεισφορά των γειτονικών κελιών ως εξής:

$$d_e = \frac{A_e}{\sum a_{nb} - a_e} \text{ και } d_n = \frac{A_n}{\sum a_{nb} - a_n} \quad (6.52)$$

Η αφαίρεση του κεντρικού συντελεστή από το άθροισμα των συντελεστών των γειτονικών σημείων στον παρανομαστή της εξίσωσης (6.52), μειώνει σημαντικά την επίδραση της παράλειψης των γειτονικών διορθώσεων των ταχυτήτων στην εξίσωση (6.47). Αυτή η βελτίωση οδήγησε στον αλγόριθμό SIMPLEC, για τον οποίο δεν ήταν απαραίτητη η υποχαλάρωση της εξίσωσης διόρθωσης πίεσης.

Όσο για αλγόριθμο SIMPLER, η μείζων διαφορά του από τον SIMPLE έγκειται στο γεγονός ότι το πεδίο πιέσεων προκύπτει από το προηγούμενο πεδίο ταχυτήτων και δεν εκτιμάται, ενώ η διόρθωση πίεσης χρησιμοποιείται μόνο για να διορθώσει τα πεδία ταχυτήτων και όχι την πίεση. Στον αλγόριθμο SIMPLER (SIMPLE Revised), που προτάθηκε από τον Patankar, η διακριτοποιημένη εξίσωση της συνέχειας χρησιμοποιείται για να παράγει την διακριτοποιημένη εξίσωση της πίεσης αντί για την εξίσωση διόρθωσης πίεσης όπως συμβαίνει στον SIMPLE. Έτσι, το ενδιάμεσο πεδίο της πίεσης λαμβάνεται άμεσα χωρίς τη χρήση διόρθωσης, αλλά οι ταχύτητες εξακολουθούν να λαμβάνονται με διόρθωση.



Σχήμα 6.14: Λογικό διάγραμμα λειτουργίας αλγορίθμου SIMPLE

Ένας άλλος αλγόριθμος που ανήκει επίσης στην οικογένεια των αλγόριθμων SIMPLE και είναι διαθέσιμος στον εμπορικό κώδικα Fluent, είναι ο PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators), ο οποίος προτάθηκε από τον Issa (1986). Ο αλγόριθμος αυτός περιλαμβάνει τα ίδια βήματα όπως και ο SIMPLE με ένα επιπλέον βήμα πρόβλεψης. Πιο αναλυτικά, το βασικό μειονέκτημα των αλγόριθμων SIMPLE και SIMPLEC, είναι ότι οι νέες ταχύτητες και οι αντίστοιχες ροές (fluxes) δεν ικανοποιούν το ισοζύγιο ορμής, μετά την επίλυση της εξίσωσης διόρθωσης της πίεσης. Αυτό έχει ως συνέπεια ο υπολογισμός να επαναλαμβάνεται μέχρι να επιτευχθεί το ισοζύγιο ορμής. Για την βελτίωση της απόδοσης του υπολογισμού αυτού, ο αλγόριθμος PISO παρέχει δύο επιπλέον διορθώσεις : τη γειτονική διόρθωση και την skewness (Fluent, 1998).

Στο σημείο αυτό κρίνεται σκόπιμο να αναφέρουμε κάποια σχόλια όσον αφορά τους προαναφερόμενους αλγόριθμους. Στον αλγόριθμο SIMPLE η διορθωμένη πίεση είναι ικανοποιητική για την διόρθωση των ταχυτήτων αλλά όχι τόσο καλή για τη διόρθωση της πίεσης. Έτσι, η βελτιωμένη έκφραση του SIMPLER χρησιμοποιεί την διορθωμένη πίεση μόνο για την διόρθωση των ταχυτήτων και εν συνεχεία μια ξεχωριστή πιο αποτελεσματική εξίσωση πίεσης επιλύεται για να δώσει το πεδίο πιέσεων. Επιπλέον, καθώς δεν παραλείπεται κανένας όρος στον SIMPLER κατά την εκτίμηση της διακριτοποιημένης εξίσωσης της πίεσης, το παραγόμενο πεδίο πιέσεων αντιστοιχεί στο πεδίο ταχυτήτων. Με άλλα λόγια η εφαρμογή του διορθωμένου πεδίου ταχυτήτων δίνει το σωστό πεδίο πιέσεων, κάτι το οποίο δεν συμβαίνει στον αλγόριθμο SIMPLE. Άρα ο αλγόριθμος SIMPLER παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα κατά την επίλυση των εξισώσεων ορμής και είναι εξαιρετικά αποτελεσματικός στον ορθό υπολογισμό του πεδίου πιέσεων. Αν και ο αριθμός των υπολογισμών που εμπεριέχονται στον SIMPLER είναι περίπου 30% περισσότεροι από τον SIMPLE, ωστόσο ο μεγάλος ρυθμός σύγκλισης που παρουσιάζει μειώνει τον χρόνο υπολογισμού έως και 50 %.

Οι αλγόριθμοι SIMPLEC και PISO, έχει αποδειχθεί πως είναι εξίσου αποτελεσματικοί με τον SIMPLER και δεν είναι εύκολο να ισχυριστεί κατηγορηματικά κάποιος πως είναι καλύτεροι από αυτόν καθώς η απόδοση του κάθε αλγόριθμου εξαρτάται από τις συνθήκες ροής και το βαθμό σύζευξης μεταξύ των εξισώσεων της ορμής και των βαθμωτών μεγεθών. Μια εκτενής σύγκριση των αλγόριθμων PISO, SIMPLEC και SIMPLER έγινε από τους Jang et al. (1986) για διάφορα προβλήματα μόνιμης ροής οι οποίοι κατέληξαν μεταξύ άλλων πως για προβλήματα που δεν παρατηρείται σύζευξη των εξισώσεων ορμής με κάποιο βαθμωτό μέγεθος, ο αλγόριθμος PISO απαιτήσε πολύ λιγότερη υπολογιστική προσπάθεια από τους άλλους δύο (Versteeg & Malalasekera, 1995).

Τα ακόλουθα συμπεράσματα προκύπτουν για τη συμπεριφορά των παραπάνω αλγόριθμων σε πυκνά, ανισοκατανεμημένα πλέγματα (πυκνά ή αραιά) και σε ροές που η μαθηματική τους περιγραφή περιλαμβάνει μεγάλους όρους πηγής. Το κριτήριο σύγκλισης περιλαμβάνει την διατήρηση της μάζας και της ορμής, καθώς μόνο η διατήρηση της μάζας δεν είναι επαρκές κριτήριο, γιατί διαφορετικοί αλγόριθμοι μπορεί να οδηγήσουν σε διαφορετικά αποτελέσματα με τις ίδιες αρχικές και συνοριακές συνθήκες.

Με δεδομένο την ικανοποίηση των παραπάνω κριτηρίων, ο αλγόριθμος SIMPLEX απαιτεί το μεγαλύτερο CPU χρόνο εκτέλεσης, στην συνέχεια ο SIMPLER, έπειτα ο SIMPLE και τον ελάχιστο χρόνο χρειάζεται ο SIMPLEC. Κάτω από τις ίδιες συνθήκες, ο SIMPLE επιδεικνύει την χειρότερη προσαρμοστικότητα και ακολουθεί ο SIMPLER. Η προσαρμοστικότητα των SIMPLEC και SIMPLEX είναι σχεδόν η ίδια, αρκετά ανώτερη των δύο πρώτων με λίγο καλύτερη στα σημεία αυτή του SIMPLEX. Τέλος, για προσομοιώσεις με σχετικά μεγάλα πλέγματα συνίσταται η χρήση του SIMPLEC, λόγω αυξημένης προσαρμοστικότητας και μικρότερου χρόνου εκτέλεσης (Φεΐδαρος, 2006).

Επισημαίνεται τέλος για άλλη μια φορά πως η συγκεκριμένη μεταπτυχιακή εργασία δεν αποσκοπεί στην ανάπτυξη νέων αριθμητικών σχημάτων για την επίλυση των εξισώσεων ροής. Παρ' όλα αυτά, ο εμπορικός κώδικας Fluent που χρησιμοποιήθηκε δίνει τη δυνατότητα στον χρήστη να επιλέξει μεταξύ ενός αριθμού από σχήματα διακριτοποίησης. Θεωρήθηκε λοιπόν σκόπιμη η παράθεση ενός κεφαλαίου με συνοπτική αναφορά στα κυριότερες αριθμητικές τεχνικές, εισάγοντας τον αναγνώστη στο σύνθετο και τεράστιο χώρο της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής.

7. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΡΟΗΣ ΔΕΞΑΜΕΝΩΝ ΧΛΩΡΙΩΣΗΣ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΔΙΔΙΑΣΤΑΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

7.1. Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Ο σχεδιασμός των δεξαμενών χλωρίωσης παραμένει ακόμη και σήμερα εμπειρικός, βασιζόμενος στην ικανοποίηση του κριτηρίου του ελάχιστου επιθυμητού όγκου, με τη θεώρηση πάντοτε της επίτευξης εμβολικής ροής κατά μήκος της δεξαμενής. Ωστόσο, όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο η υπόθεση της εμβολικής ροής δεν είναι απόλυτα ορθή καθώς στην πράξη η ροή είναι αρκετά πιο σύνθετη (Wang & Falconer, 1998a).

Παραδοσιακά, οι μηχανικοί για την υδραυλική μελέτη των δεξαμενών επαφής ανέπτυξαν ορισμένα βαθμωτά φυσικά μοντέλα. Ένας ιχνηθέτης εισέρχεται ακαριαία στη δεξαμενή και καταγράφεται στην έξοδο η μεταβολή της συγκέντρωσής του με το χρόνο (flow – through curves / FTC). Ωστόσο, είναι αδύνατη η διατήρηση της συνέχειας στις διεργασίες ανάμιξης των βαθμωτών φυσικών μοντέλων καθώς είναι εφικτή η κλιμάκωση μόνο του αριθμού Froude (επίδραση της βαρύτητας) ή μόνο του αριθμού Reynolds (επίδραση του ιξώδους) και όχι και των δύο. Συνεπώς, το κύριο μειονέκτημα των βαθμωτών μοντέλων αποτελεί αφενός η υπερεκτίμηση των διεργασιών διασποράς-διάχυσης και της ταχύτητας μεταφοράς, εξαιτίας της παραγόμενης τύρβης στην κλίνη και αφετέρου η υποεκτίμηση των επιδράσεων της τριβής της κλίνης. Η εξέλιξη των δυνατοτήτων των ηλεκτρονικών υπολογιστών οδήγησε στην ανάπτυξη αριθμητικών μοντέλων τα οποία δεν εμφανίζουν προβλήματα κλιμάκωσης και επιπλέον είναι ευέλικτα και αποτελεσματικά (Falconer & Ismail, 1997).

Ιδιαίτερα πλούσια είναι η βιβλιογραφία όσον αφορά τη χρήση αριθμητικών μεθόδων και μοντέλων τύρβης, για την πρόβλεψη του πεδίου ροής στις δεξαμενές καθίζησης, συμπεριλαμβάνοντας μεταξύ άλλων τους Larsen (1977), Schamber & Larock (1981), Iman et al. (1983), Celik et al. (1985), De vantier & Larock (1986, 1987), Lyn & Zhang (1989), Adams & Rodi (1990) και Zou et al., (1994). Το k-ε μοντέλο της τύρβης χρησιμοποιήθηκε επιτυχώς σε πολλά από αυτά τα αριθμητικά μοντέλα παρόλο που στην ουσία δεν υπολογίστηκαν οι παράμετροι του μοντέλου αυτού για τις διαφορετικές δεξαμενές. Τα μοντέλα αυτά αποτέλεσαν μια σημαντική πρόοδο σε σχέση με το μονοδιάστατο μοντέλο που ίσχυε μέχρι τότε (Dobbins 1944, Camp 1946) και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να προσομοιώσουν

με μεγάλη ακρίβεια το πεδίο ροής μιας δεξαμενής καθίζησης, για συνθήκες ομογενούς πυκνότητας (Wang & Falconer, 1998b).

Στο σχεδιασμό των δεξαμενών επαφής, το κύριο μέλημα αποτελεί η επίτευξη της μέγιστης απόδοσης απολύμανσης, με το ελάχιστο ποσό υπολειμματικού χλωρίου, το οποίο βάση εμπειρίας από προηγούμενα πειράματα απαιτεί έντονη αρχική ανάμιξη, επαρκή χρόνο επαφής σε δεξαμενή εμβολικής ροής και αυτόματα και αξιόπιστη ρύθμιση του υπολειμματικού χλωρίου. Ως συνέπεια αυτών, απαιτούνται πιο σύνθετες οριακές συνθήκες εισόδου και σχετικά υψηλότεροι λόγοι μήκους/πλάτους από αυτούς που επικράτησαν στις δεξαμενές καθίζησης. Συνεπώς, τα αριθμητικά μοντέλα που συναντώνται στη βιβλιογραφία, για τον υπολογισμό της ροής στις δεξαμενές καθίζησης, παρουσιάζουν σημαντικούς περιορισμούς για την προσομοίωση των διεργασιών απολύμανσης σε δεξαμενές επαφής (Wang & Falconer, 1998a).

Οι βιβλιογραφικές αναφορές για την εκτίμηση του πεδίου της ροής της διεργασίας της απολύμανσης σε δεξαμενές επαφής με τη χρήση αριθμητικών μοντέλων είναι περιορισμένες και απέχουν χρονικά μεταξύ τους. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι οι Hart και Vogiatzis (1982) υπολόγισαν το κλάσμα των βακτηρίων που παρέμεινε στη δεξαμενή κάνοντας χρήση των αριθμών διασποράς, που προέκυψαν από τις μετρούμενες καμπύλες FTC (μεταβολή συγκέντρωσης ιχνηθέτη με το χρόνο), όμως δεν λύσανε την εξίσωση μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας. Αργότερα, οι Falconer και Liu (1988), χρησιμοποιώντας ένα διδιάστατο μέσου βάθους αριθμητικό μοντέλο, προέβλεψαν το πεδίο ταχυτήτων και την χωροταξική διανομή των συγκεντρώσεων ενός ιχνηθέτη, σε όλα τα σημεία δύο δεξαμενών χλωρίωσης, υπογραμμίζοντας ότι η ορθή μοντελοποίηση των τυρβωδών τάσεων (ή φαινομενικές τάσεις ή τάσεις Reynolds) ήταν ιδιαίτερα σημαντική για να μπορέσει το μοντέλο να προβλέψει επακριβώς το αντίστοιχο πεδίο ταχύτητας. Επιπρόσθετα, κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι το απλό μηδενικής εξίσωσης μοντέλο μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος, που χρησιμοποιήθηκε στην μελέτη τους, δεν ήταν αρκετά ακριβές για να αναπαράγει τα χαρακτηριστικά της ροής στα διάφορα τμήματα της δεξαμενής (Wang & Falconer, 1998a). Παράλληλα, παρατήρησαν μια έντονη ανακολουθία μεταξύ των μετρούμενων και των προβλεπόμενων τιμών κυρίως στην είσοδο και στην έξοδο της δεξαμενής, διότι η ροή στις περιοχές αυτές είναι τριών διαστάσεων.

Στις δεξαμενές χλωρίωσης (δεξαμενές επαφής), οι επιδράσεις στις τρεις διαστάσεις, για παράδειγμα η διακύμανση της ταχύτητας στην κατακόρυφη διεύθυνση, μπορούν επίσης να επηρεάσουν την διεργασία μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας. Ωστόσο, οι ροές, σε αυτού του τύπου τις δεξαμενές, παρουσιάζουν κάποια μοναδικά χαρακτηριστικά, που επιτρέπουν

ένα διδιάστατο μοντέλο να παρουσιάζει ιδιαίτερη ακρίβεια στην περιγραφή της μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας και της βιολογικής απομείωσης των οργανισμών.

Όλες οι διακυμάνσεις των αρμόδιων ποσοτήτων (υδροδυναμικά και χημικά χαρακτηριστικά καθώς και χαρακτηριστικά εισόδου), είναι σημαντικά μικρότερες στην κατακόρυφη διεύθυνση, σε σχέση με τις διακυμάνσεις που παρατηρούνται κατά μήκος και κατά πλάτος της ροής, εκτός βέβαια από το οριακό στρώμα κοντά στον πυθμένα της δεξαμενής και ίσως και κοντά στην ελεύθερη επιφάνεια. Συνεπώς, **ένα διδιάστατο ή ένα μέσου - βάθους (depth-average) διδιάστατο μοντέλο μπορεί να αποδώσει ρεαλιστικά τις λεπτομέρειες της συμπεριφοράς της διεργασίας της χλωρίωσης (ροή – μεταφορά - απολύμανση)**. Παρόλο που η συνεχής εξέλιξη των υπολογιστικών μεθόδων και της υπολογιστικής ισχύος, κάνουν την ανάλυση στις τρεις διαστάσεις να δείχνει εφικτή, ωστόσο μέχρι σήμερα παραμένει εύλογα ως λύση ανάγκης για ειδικά προβλήματα (Wang et al.,2003).

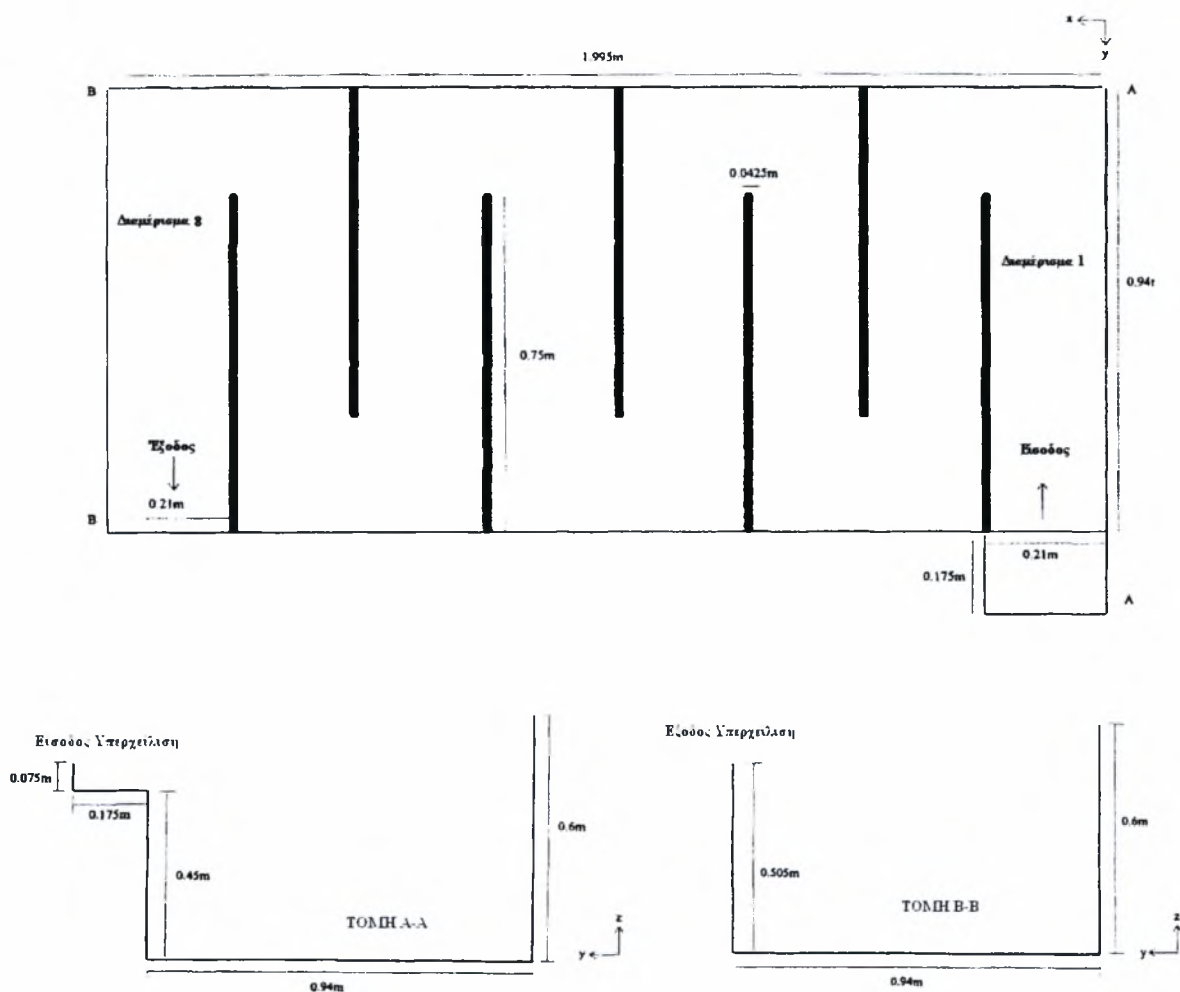
Οι ολοκληρωμένες κατά βάθος θεμελιώδεις εξισώσεις διατήρησης της ορμής, που διέπουν τη ροή του νερού σε μια δεξαμενή επαφής, μπορούν να προκύψουν από την ολοκλήρωση των εξισώσεων Navier –Stokes στις τρεις διαστάσεις, για όλο το βάθος της στήλης του νερού. Αντίστοιχα, η ολοκληρωμένη κατά βάθος εξίσωση διατήρησης της μάζας (εξίσωση συνέχειας), προκύπτει ολοκληρώνοντας την εξίσωση διατήρησης της μάζας στις τρεις διαστάσεις, για όλο το βάθος της στήλης του νερού. Ομοίως η ολοκληρωμένη κατά βάθος εξίσωση συναγωγής – διάχυσης, που διέπει την μεταφορά του ιχνηθέτη, προήλθε από την ολοκλήρωση της εξίσωσης διατήρησης της μάζας της διαλυμένης ουσίας στις τρεις διαστάσεις (Falconer & Ismail, 1997).

Οι θεμελιώδεις αυτές, ολοκληρωμένες κατά βάθος, διδιάστατες εξισώσεις, αποτέλεσαν την βάση του 2-D μαθηματικού μοντέλου που ανέπτυξαν πολλοί ερευνητές για την προσομοίωση της ροής και των φαινομένων μεταφοράς των δεξαμενών χλωρίωσης, τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα των οποίων αναλύονται στην επόμενη ενότητα.

7.2. Παρουσίαση αποτελεσμάτων πρόσφατων ερευνών

Στο σημείο αυτό θα γίνει μια πιο εκτενής ανάλυση των αποτελεσμάτων και των συμπερασμάτων που προέκυψαν από πρόσφατες εργασίες προσομοίωσης της ροής και των φαινομένων μεταφοράς δεξαμενών χλωρίωσης, με τη χρήση ενός μέσου - βάθους (depth-average) διδιάστατου μοντέλου, με σκοπό την εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων που θα αποτελέσουν την βάση για τη δική μας παραμετρική ανάλυση.

Οι **Falconer & Ismail (1997)**, συγκρίνανε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη μοντελοποίηση της μεταφοράς ενός ιχνηθέτη, σε μια σπειροειδούς διαμόρφωσης δεξαμενή χλωρίωσης, με τη χρήση ενός μέσου - βάθους (depth-average) διδιάστατου μοντέλου (οι όροι των διατμητικών τάσεων εκφράστηκαν από ένα απλό μηδενικής εξίσωσης μοντέλο μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος και η διακριτοποίηση των όρων συναγωγής έγινε με το σχήμα QUICK), με τα δεδομένα που συλλέχθηκαν κατά τη διεξαγωγή εργαστηριακών πειραμάτων στην ίδια δεξαμενή. Πιο αναλυτικά, η δεξαμενή που μελετήθηκε ήταν η δεξαμενή του Σχήματος 7.1 (δεξαμενή επαφής EMBASAY στο West Yorkshire του Ηνωμένου Βασιλείου), στην οποία είχαν προηγουμένως διεξαχθεί πειραματικές μετρήσεις από τους Shiono et al. (1991).



Σχήμα 7.1: Δεξαμενή χλωρίωσης Embsay στο Yorksire, U.K., η οποία αποτέλεσε το αντικείμενο μελέτης των περισσότερων εργασιών που περιγράφονται στην ενότητα αυτή. (Falconer & Ismail, 1997), (Wang & Falconer, 1998a) & (Wang & Falconer, 1998b)

Η σύγκριση των υπολογιζόμενων συγκεντρώσεων σε ένα μέσο βάθος και των μετρούμενων συγκεντρώσεων σε διάφορα ύψη από τον πυθμένα, έδωσε μια πολλή καλή

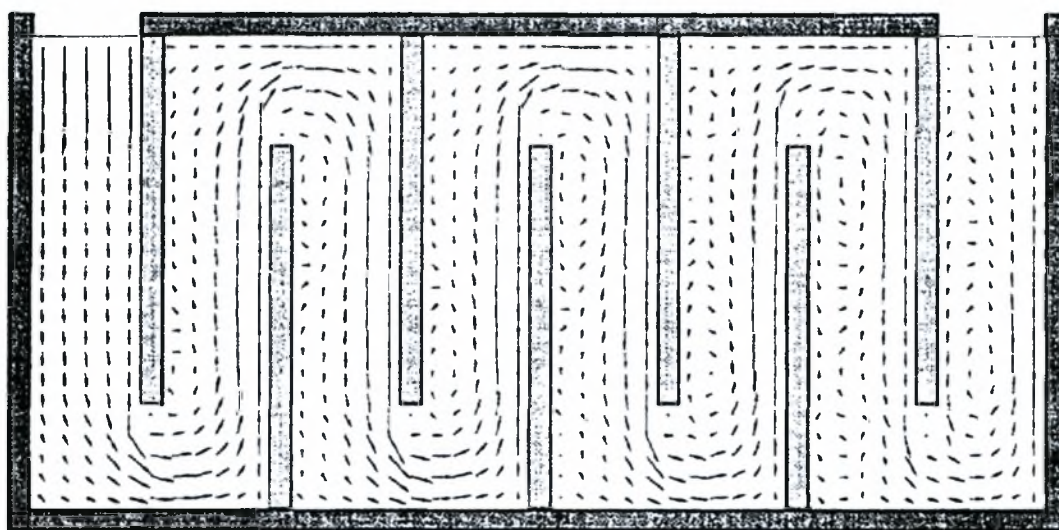
ταύτιση για τα διαμερίσματα 4 έως και 8, όπου η ροή είναι σχεδόν ομοιόμορφη σε όλο το βάθος. Ωστόσο, η συμφωνία για τα διαμερίσματα 1 έως και 3 δεν ήταν καλή, διότι το ολοκληρωμένο σε βάθος διδιάστατο μοντέλο δεν ήταν ικανό να περιγράψει τις οριζόντιες αλλά και κατακόρυφες ανακυκλοφορίες που ήταν εξαιρετικά έντονες στα διαμερίσματα αυτά, ως αποτέλεσμα της διαμόρφωσης της εισόδου και των αποκολλήσεων της ροής από τα τοιχώματα.

Γενικά, η ακρίβεια και η αξιοπιστία ενός αριθμητικού μοντέλου, στην πρόβλεψη των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών και των διεργασιών απολύμανσης μιας δεξαμενής επαφής, εξαρτάται κυρίως από την ακρίβεια με την οποία υπολογίζονται οι όροι συναγωγής (advection) και οι όροι των διατμητικών τάσεων (Wang et al., 2003) & (Wang & Falconer, 1998a).

Έχοντας αυτό ως κανόνα, οι **Wang & Falconer, (1998b)** ανέπτυξαν ένα μοντέλο προσομοίωσης, για ένα υπολογιστικό πακέτο, με σκοπό την πρόβλεψη της ροής και των διεργασιών απολύμανσης, που λαμβάνανε χώρα στη δεξαμενή επαφής, του Σχήματος 7.1.

Οι όροι των διατμητικών τάσεων αρχικώς εκφράστηκαν από ένα απλό μηδενικής εξίσωσης μοντέλο μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος, τα αποτελέσματα από το οποίο αναλύθηκαν και συγκρίθηκαν με αυτά που προέκυψαν από τη χρήση εναλλακτικά των μοντέλων $k-\epsilon$ και Smagorinsky, με σκοπό την βελτίωση των προβλέψεων του αρχικού μοντέλου. Η διακριτοποίηση των όρων συναγωγής στο βασικό αρχικό μοντέλο έγινε με ένα ανάντη πρώτης τάξης διαφορικό σχήμα, τα αποτελέσματα από το οποίο επίσης αναλύθηκαν και συγκρίθηκαν με αυτά από τη χρήση δύο εναλλακτικών σχημάτων του QUICK και του ανάντη τρίτης τάξεως διαφορικού σχήματος. Στο σημείο αυτό πρέπει να τονίσουμε πως το QUICK αποτελεί γενικά ένα ανάντη τρίτης τάξεως διαφορικό σχήμα για το οποίο έχουν γενικά αναπτυχθεί διάφορες παραλλαγές και συνεπώς η παραπάνω διάκριση από τους συγγραφείς αναφέρεται προφανώς σε δύο διαφορετικές εκφράσεις-παραλλαγές του σχήματος QUICK. Οι συνολικοί συνδυασμοί που χρησιμοποιήθηκαν φαίνονται στον Πίνακα 7.1 (πρώτη στήλη – εξισώσεις κίνησης). Τέλος, οι προβλέψεις που πραγματοποιήθηκαν με τη χρήση αρκετών συνδυασμών από τα προαναφερόμενα μοντέλα τύρβης και σχήματα διακριτοποίησης, ελέγχθηκαν σε σχέση με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διεξαγωγή μετρήσεων σε ένα πανομοιότυπο εργαστηριακής κλίμακας μοντέλο της υπό εξέταση γεωμετρίας και οδήγησαν στην εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων που συνοψίζονται στα παρακάτω:

- **Οριζόντια Ανακυκλοφορία :** Το k-ε μοντέλο ήταν το μόνο μοντέλο που προέβλεψε επακριβώς την οριζόντια ανακυκλοφορία σε καθένα από τους ανεξάρτητους θαλάμους (διαδρόμους) της δεξαμενής, παρουσιάζοντας επίσης ταύτιση της έκτασης των προβλεπόμενων ανακυκλοφοριών με τις μετρούμενες. Η χρήση στις εξισώσεις ορμής του απλού μηδενικής εξίσωσης μοντέλου μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος, έδωσε ένα πεδίο ροής στο οποίο απουσίαζαν πλήρως οι ανακυκλοφορίες, ακόμη και στην περίπτωση που χρησιμοποιήθηκε το ανάντη τρίτης τάξεως διαφορικό σχήμα για την αριθμητική διακριτοποίηση των όρων συναγωγής. Από την άλλη, η χρήση του Smagorinsky SGS μοντέλου τάσεων, για την περίπτωση της προσομοίωσης μεγάλων δινών (large eddy simulation – LES), απέτυχε επίσης να αποδώσει τις ανακυκλοφορίες του πεδίου ροής, διότι απαιτεί την ανάπτυξη ενός πολύ πιο αναλυτικού πλέγματος από το υφιστάμενο, για να μπορέσει να δώσει μια πιο καλή προσομοίωση της ροής. Στο σχήμα 7.2 φαίνεται το πεδίο ροής όπως προέκυψε από τη χρήση του k-ε μοντέλου της τύρβης σε συνδυασμό με ένα ανάντη πρώτης τάξης διαφορικό σχήμα διακριτοποίησης.



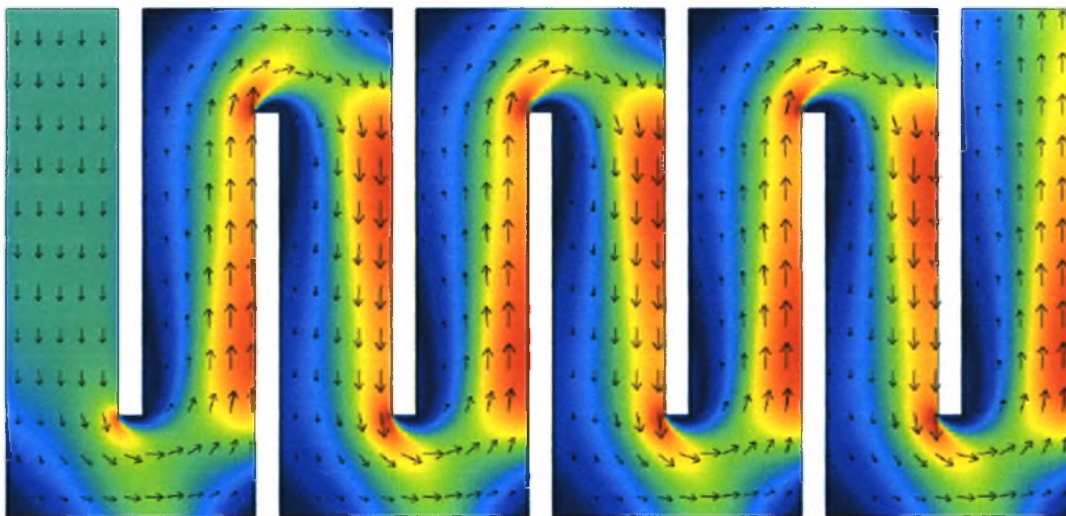
Σχήμα 7.2. : Δεξαμενή χλωρίωσης Embsay στο Yorksire, U.K.. Πεδίο ροής με χρήση του k-ε μοντέλου και ενός ανάντη πρώτης τάξεως διαφορικού σχήματος διακριτοποίησης. Είναι εμφανής η ορθή απόδοση των ανακυκλοφοριών σε κάθε διάδρομο της δεξαμενής. (Wang H. & Falconer R.A., 1998b)

Οι κύριες ζώνες ανακυκλοφορίας της ροής παρατηρούνται στα σημεία ένωσης των εξωτερικών τοιχίων της δεξαμενής με τα εσωτερικά διαχωριστικά τοιχία (γωνίες 90°) καθώς και στο πίσω μέρος (προς την διεύθυνση της ροής) των εσωτερικών διαχωριστικών τοιχίων

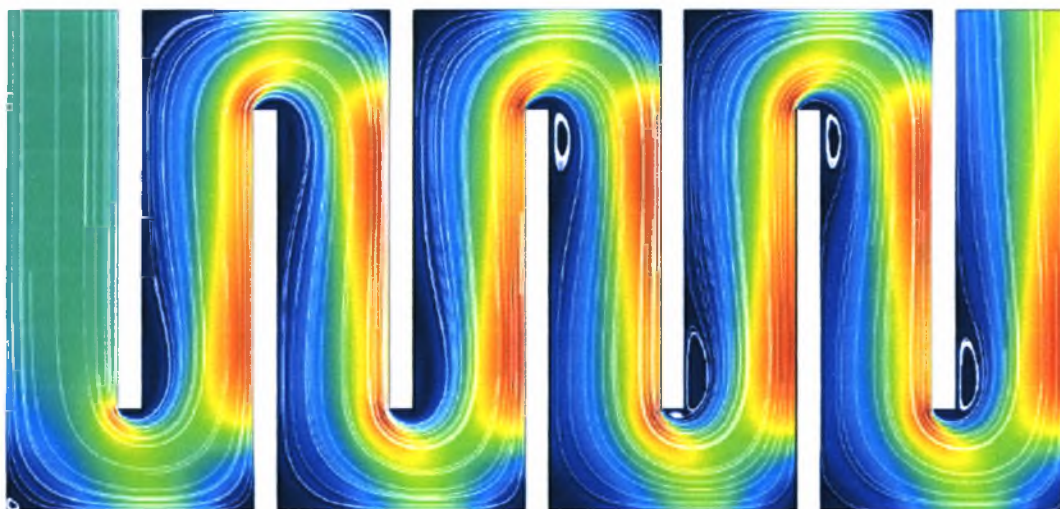
(baffles) και συγκεκριμένα στα σημεία αλλαγής της διεύθυνσης της ροής ως αποτέλεσμα της αποκόλλησης της ροής. Η έκταση των προβλεπόμενων ανακυκλοφοριών είναι πιο έντονη στα σημεία πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία και μικρότερη στις ορθές γωνίες στην αρχή και στο τέλος κάθε διαμερίσματος. Οι ανακυκλοφορίες αυτές αναπτύσσουν νεκρές ζώνες οι μεγαλύτερες από τις οποίες έχουν σημαντική επίπτωση στην απόδοση των δεξαμενών επαφής καθώς οδηγούν σε σημαντική απόκλιση από την εμβολική ροή.

Η συμβατική χρήση διαχωριστικών εσωτερικών τοιχίων στο σχεδιασμό των δεξαμενών επαφής, επιδιώκει τη σκέδαση της κινητικής ενέργειας της εισερχόμενης ροής, την ενδυνάμωση της ανάμιξης καθ' όλη τη διατομή και την αποφυγή ανακυκλοφοριών. Οι επιδράσεις αυτές πρέπει να μπορούν αναπαραχθούν κατάλληλα με την αριθμητική προσομοίωση. Το k-ε μοντέλο της τύρβης χρησιμοποιεί μια εξίσωση μεταφοράς, με την οποία περιγράφει επιτυχώς τη μεταφορά και τη σκέδαση της ενέργειας της τύρβης, που προκαλείται από την καμπύλη ροή η οποία γεννάται εξαιτίας των εξωτερικών τοιχίων και των εσωτερικών διαχωριστικών τοιχίων της δεξαμενής.

Στα πιο πάνω συμπεράσματα συνηγορεί και η εργασία του Gualtieri, ο οποίος μελέτησε την ίδια δεξαμενή, χρησιμοποιώντας ένα εμπορικό κώδικα (Multiphysics 3.2a). Τα αποτελέσματα της εργασίας του συνοψίζονται στο Σχήμα 7.3 που ακολουθεί, όπου είναι εμφανής η ταύτιση με τα αποτελέσματα της εργασίας των Wang & Falconer (1998b).



Σχήμα 7.3 : Δεξαμενή χλωρίωσης Embsay στο Yorksire, UK. Πεδίο ροής και ροϊκές γραμμές (με χρήση του k-ε μοντέλου). Είναι εμφανής η ορθή απόδοση των ανακυκλοφοριών σε κάθε διάδρομο της δεξαμενής (στο πίσω μέρος των διαχωριστικών τοιχίων και στις γωνίες) (Gualtieri) (συνεχίζεται)



Σχήμα 7.3. : Δεξαμενή χλωρίωσης Embsay στο Yorksire, UK. Πεδίο ροής και ροϊκές γραμμές (με χρήση του k-ε μοντέλου). Είναι εμφανής η ορθή απόδοση των ανακυκλοφοριών σε κάθε διάδρομο της δεξαμενής (στο πίσω μέρος των διαχωριστικών τοιχίων και στις γωνίες) (Gualtieri)(συνέχεια)

- Μέση Εγκάρσια Ταχύτητα (Cross-sectional average velocity):** Αν και το k-ε μοντέλο έδωσε μια πολύ καλή πρόβλεψη των ανακυκλοφοριών του πεδίου ροής, παράλληλα όμως προέβλεψε μια μικρότερη μέση εγκάρσια ταχύτητα προς το τέλος της δεξαμενής, πιθανόν εξαιτίας της υπερεκτίμησης των τυρβωδών διατμητικών τάσεων. Αντίθετα η πρόβλεψη της μέσης εγκάρσιας ταχύτητας με τη χρήση του Smagorinsky μοντέλου και του απλού μηδενικής εξίσωσης μοντέλου μήκους ανάμιξης, με τη συνδυασμένη χρήση του ανάντη τρίτης τάξεως διαφορικού σχήματος διακριτοποίησης, έδειξε μια πολύ καλή συμφωνία με τις μετρήσεις, για το δεύτερο μισό της δεξαμενής προς την κατεύθυνση της ροής.
- Χαρακτηριστικοί παράμετροι που αναπαριστούν τις διατμητικές τάσεις και την τυρβώδη ανάμιξη:** Η επίδραση της διάτμησης και της ανάμιξης μπορεί να αναπαραχθεί επιτυχώς από τη μέγιστη διαφορά της ταχύτητας σε οποιαδήποτε εγκάρσια διατομή, δηλαδή από τη σχέση $(u_{\max} - u_{\min}) / U_0$, όπου u_{\max} και u_{\min} η μέγιστη και ελάχιστη μέση κατά βάθος ταχύτητα στην εγκάρσια διατομή και U_0 η μέση εγκάρσια ταχύτητα. Το k-ε μοντέλο έδωσε την πλέον ακριβή πρόβλεψη της τυρβώδους ανάμιξης σε μια εγκάρσια διατομή, παρόλο που όπως αναφέραμε προηγουμένως μπορεί να υπερεκτίμησε την συνολική τάση διάτμησης. Τα άλλα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν στη μελέτη αυτή απέτυχαν να δώσουν μια ακριβή

προσομοίωση της διάτμησης και της ανάμιξης στη ροή, παρόλο που προέβλεψαν με συνέπεια τη μέση επίδραση της συναγωγής.

Το κεντρικό συμπέρασμα από την συγκεκριμένη εργασία είναι ότι τα διαφορετικά προβλήματα μηχανικής απαιτούν αντίστοιχα την χρήση διαφορετικών μοντέλων. Ωστόσο, η λανθασμένη επιλογή μοντέλου μπορεί να οδηγήσει σε παραπλανητικά αποτελέσματα.

Σε μια μετέπειτα μελέτη τους οι **Wang & Falconer, (1998^a)**, υποστήριξαν πως η αξιοπιστία των προβλέψεων της μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας (μεταβολή συγκέντρωσης χλωρίου ή / και μικροοργανισμών), εξαρτάται ισχυρά από την ακρίβεια με την οποία προσδιορίζονται τα υδροδυναμικά χαρακτηριστικά της δεξαμενής (επίλυση των εξισώσεων κίνησης). Η υδροδυναμική ανάλυση των δεξαμενών επαφής περιλαμβάνει όπως είδαμε ένα συνδυασμό ποικίλων μοντέλων τύρβης και αριθμητικών σχημάτων με σκοπό την καλύτερη δυνατή προσέγγιση των τυρβωδών τάσεων και των όρων συναγωγής, τα αποτελέσματα των οποίων παρουσιάστηκαν παραπάνω. Ένα από τα ερωτήματα που επιδίωξαν επίσης να απαντήσουν με τη μελέτη αυτή ήταν σε ποιο βαθμό η ακρίβεια της διακριτοποίησης των όρων συναγωγής στις εξισώσεις μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας (εξισώσεις συγκέντρωσης) καλλιεργεί την ασυμφωνία μεταξύ της προβλεπόμενης συγκέντρωσης (μέσω προσομοίωσης) και των μετρήσεων του φυσικού μοντέλου ή των μετρήσεων πεδίου (επιτόπου μετρήσεις). Για το λόγο αυτό, οι όροι συναγωγής της εξίσωσης μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας (εξισώσεις συγκέντρωσης) αποτιμήθηκαν με τη χρήση του Quick σχήματος διακριτοποίησης και με τη χρήση του ανάντη τρίτης τάξεως διαφορικού σχήματος (οι διαφορά των εν λόγω σχημάτων αναφέρθηκε παραπάνω – στην ουσία αποτελούν δύο παραλλαγές του QUICK), σε διαφορετικές προσομοιώσεις. Επιπλέον, η αριθμητική πρόβλεψη της μεταφοράς του ιχνηθέτη στη δεξαμενή επαφής, για την περίπτωση παλμικής προσθήκης, συγκρίθηκε με τις πειραματικές μετρήσεις που διεξήχθησαν σε ένα πανομοιότυπο εργαστηριακής κλίμακας μοντέλο της υπό εξέταση γεωμετρίας (φυσικό μοντέλο).

Στο σημείο αυτό αξίζει να αναφέρουμε πως το σχήμα διακριτοποίησης QUICK έχει κερδίσει έδαφος τα τελευταία χρόνια και έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς σε διάφορες εφαρμογές, συμπεριλαμβανομένων της μοντελοποίησης των όρων συναγωγής στη διδιάστατη εξίσωση συναγωγής – διάχυσης και στις τρισδιάστατες εξισώσεις κίνησης στη μόνιμη κατάσταση. Το εν λόγω σχήμα παρέχει μια τρίτης τάξεως ακριβή διαδικασία παρεμβολής για την εκτίμηση της τιμής της εξαρτώμενης μεταβλητής στην επιφάνεια του όγκου ελέγχου, αλλά παρέχει μια μόλις δεύτερης τάξης προσέγγιση της μεταβλητής κλίσης (gradient).

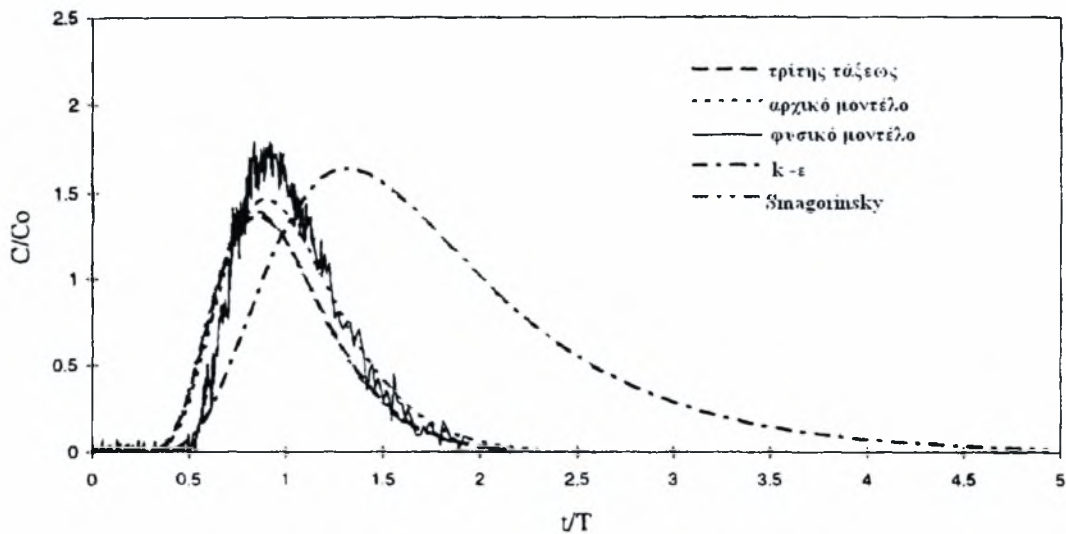
Συνεπώς, είναι προτιμότερη η χρήση μιας τρίτης τάξεως προσέγγισης για την ακριβή αποτίμηση του gradient (της κλίσης) των όρων συναγωγής.

Οι συνολικοί συνδυασμοί των μοντέλων τύρβης και των αριθμητικών σχημάτων που χρησιμοποιήθηκαν στη μελέτη αυτή συνοψίζονται στον Πίνακα 7.1.

Πίνακας 7.1.: Εναλλακτικά μοντέλα τύρβης και αριθμητικά σχήματα που μελετήθηκαν στις εργασίες των (Wang & Falconer, 1998a) & (Wang et al.,2003)

Υδροδυναμικό μοντέλο (για προσδιορισμό των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών)(Εξισώσεις Κίνησης)			Μοντέλο μεταφοράς (Εξισώσεις Συγκέντρωσης)
Run	Μοντέλο τύρβης	Αριθμητικό σχήμα	Αριθμητικό σχήμα
1.	<u>Αρχικό μοντέλο</u>		QUICK
	Μοντέλο μήκους ανάμιξης & Ανάντη πρώτης τάξης		
	Μοντέλο μήκους ανάμιξης	Ανάντη τρίτης τάξης	QUICK
	k – ε μοντέλο	Ανάντη πρώτης τάξης	QUICK
	Smagorinsky μοντέλο	Ανάντη πρώτης τάξης	QUICK
2.			
	Μοντέλο μήκους ανάμιξης	Ανάντη πρώτης τάξης	Ανάντη τρίτης τάξης

Ο βαθμός στον οποίο ο διαφορετικός τρόπος επίλυσης της υδροδυναμικής προσομοίωσης (πρόβλεψη υδροδυναμικών χαρακτηριστικών) επιδρά στις προβλέψεις μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας, παρουσιάζεται στο Σχήμα 7.4:



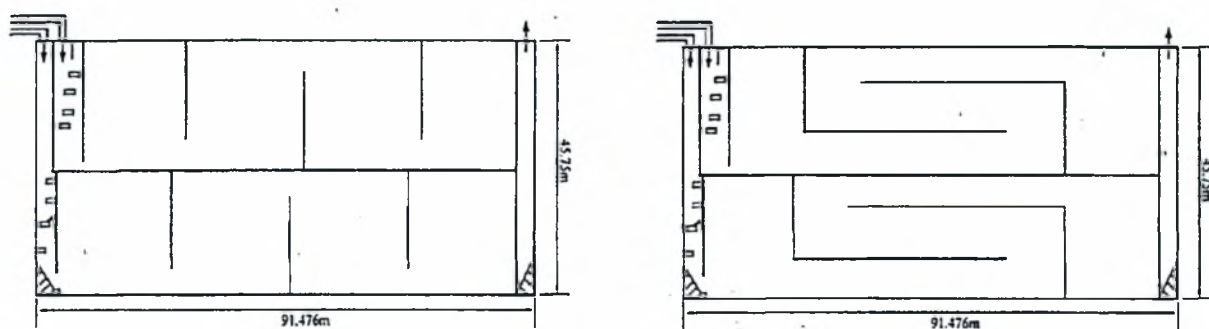
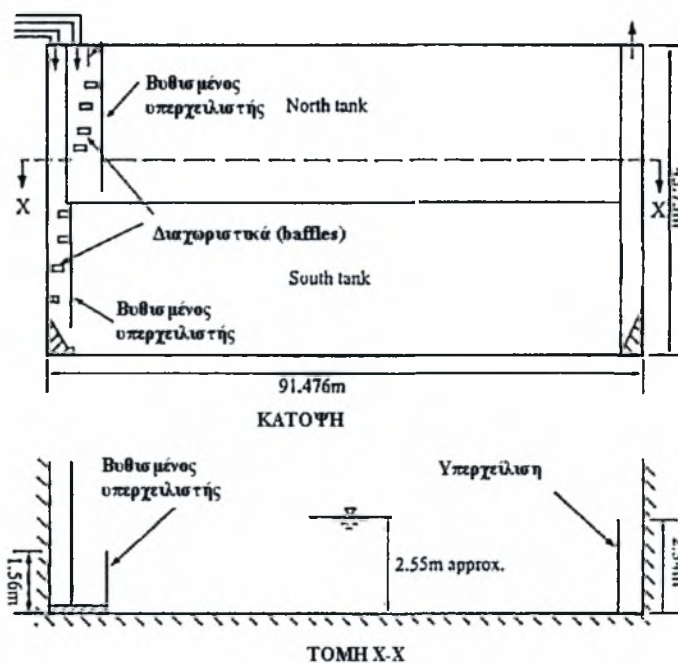
Σχήμα 7.4.: Δεξαμενή χλωρίωσης Embsay στο Yorksire, UK. Σύγκριση FTC καμπυλών μεταξύ του φυσικού μοντέλου και των διαφορετικών αριθμητικών μοντέλων. Επίδραση της υδροδυναμικής ανάλυσης (πρόβλεψη των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών - εξισώσεις κίνησης) στην πρόβλεψη μεταφοράς της διαλυμένης ουσίας (εξισώσεις συγκέντρωσης) (Wang & Falconer, 1998a).

Πιο αναλυτικά, πραγματοποιήθηκε μια σύγκριση των πειραματικών και αριθμητικά υπολογιζόμενων καμπυλών συγκέντρωσης – χρόνου (Flow through curves – FTC), χρησιμοποιώντας διάφορους συνδυασμούς διαφορικών σχημάτων και μοντέλων τύρβης στην πρόβλεψη των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών (Πίνακας 7.1 – πρώτη στήλη), ενώ για την πρόβλεψη των όρων συναγωγής στο μοντέλο μεταφοράς χρησιμοποιήθηκε το ίδιο σχήμα διακριτοποίησης π.χ. το QUICK. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 7.4 και συνοψίζονται στα εξής: Ο χρόνος στον οποίο η μέγιστη συγκέντρωση εξέρχεται της δεξαμενής έχει γενικώς προβλεφθεί με ακρίβεια. Αντίθετα, η κορυφή της καμπύλης έχει γενικά υποεκτιμηθεί για όλες τις περιπτώσεις εκτός από την περίπτωση του k - ε μοντέλου. Το k - ε μοντέλο ωστόσο αδυνατεί να προβλέψει σωστά τον μέγιστο χρόνο. Επιπρόσθετα, η παρατήρηση του σχήματος εξάγει το συμπέρασμα ότι ο χρόνος στον οποίο η μέγιστη συγκέντρωση εξέρχεται της δεξαμενής καθορίζεται κύρια από το πεδίο ταχυτήτων και συγκεκριμένα από τη μέση εγκάρσια ταχύτητα (επίδραση συναγωγής) και λιγότερο από τα χαρακτηριστικά μίξης, σε αντίθεση με τη μέγιστη συγκέντρωση που σχετίζεται με τις επιδράσεις διάχυσης και διασποράς, ως αποτέλεσμα των ανακυκλοφοριών, των δευτεροβάθμιων ροών και της τυρβώδους διάχυσης. Αυτός είναι και ο λόγος που το k - ε μοντέλο το οποίο όπως προαναφέραμε υποεκτιμά την εγκάρσια ταχύτητα (επίδραση συναγωγής) προβλέπει ένα μέγιστο χρόνο με αρκετή καθυστέρηση σε σχέση με τις μετρούμενες τιμές. Τέλος, η επιπλέον ανάλυση των FTC καμπυλών σε διαφορετικές διατομές σε διάφορα διαμερίσματα της δεξαμενής, έδειξε ότι η ισχύς των επιδράσεων της διασποράς – διάχυσης αυξάνεται κατά μήκος της δεξαμενής και προς τη διεύθυνση της ροής με την ασυμφωνία των μετρούμενων και προβλεπόμενων τιμών της μέγιστης συγκέντρωσης να αυξάνει από το διαμέρισμα 5 προς το διαμέρισμα 7.

Η επίδραση των διαφορετικών προσεγγίσεων των όρων συναγωγής της εξίσωσης μεταφοράς έγινε με τη χρήση του Quick σχήματος διακριτοποίησης και του ανάντη τρίτης τάξεως διαφορικού σχήματος, σε διαφορετικές προσομοιώσεις. Τα δύο αυτά σχήματα δώσανε τον ίδιο μέγιστο χρόνο και την ίδια μέγιστη συγκέντρωση στις FTC καμπύλες. Αυτό αποτελεί μια ακόμη απόδειξη πως ο μέγιστος χρόνος διέπεται κύρια από την επίδραση της συναγωγής της ροής.

Οι Wang et al. (2003), προχώρησαν ένα ακόμη βήμα. Όπως έγινε φανερό και από τις προηγούμενες αναφορές η ακρίβεια ενός μοντέλου προσομοίωσης εξαρτάται άμεσα από τη χρήση διαφορετικών μοντέλων τύρβης και διαφορετικών σχημάτων διακριτοποίησης και απαιτεί το σωστό κάθε φορά συνδυασμό αυτών για την ακριβή πρόβλεψη της ροής και των φαινομένων μεταφοράς. Στη μελέτη αυτή ένας αριθμός από διαφορετικές προσομοιώσεις

διεξήχθει για διαφορετικές διαμορφώσεις δεξαμενών επαφής και για διαφορετική ανάλυση-έκταση πλέγματος. Πιο αναλυτικά, αρχικά χρησιμοποιήθηκαν δύο εναλλακτικοί σχεδιασμοί δεξαμενών επαφής, όπως χαρακτηριστικά παρουσιάζονται στο Σχήμα 7.5, με σκοπό την μελέτη της επίδρασης των διαφορετικών διαμορφώσεων και των διαφορετικών τοποθετήσεων των εσωτερικών διαχωριστικών τοιχίων στην ολική συμπεριφορά και απόδοση των δεξαμενών χλωρίωσης. Οι δεξαμενές αυτές είχαν την ίδια επιφάνεια και τις ίδιες συνθήκες ροής.



Σχήμα 7.5: Δεξαμενή χλωρίωσης Elan στο Birmingham, UK. Πραγματική διαμόρφωση και δύο εναλλακτικοί σχεδιασμοί (Wang et al., 2003)

Οι διαφορές στα χαρακτηριστικά της μεταφοράς και της ανάμιξης για τις διαφορετικές διαμορφώσεις της δεξαμενής του Σχήματος 7.5 μπορούν γενικά να προβλεφθούν εάν το μοντέλο προσομοίωσης εμφανίζει πολύ μικρό αριθμητικό σφάλμα. Γενικά, η δεύτερη διαμόρφωση έδωσε πολύ λιγότερες ανακυκλοφορίες ως αποτέλεσμα των

λιγότερων νεκρών ζωνών και επέδειξε πιο έντονες επιδράσεις διασποράς σε σχέση με τον πρώτο εναλλακτικό σχεδιασμό. Συνεπώς, προτιμάται η διάταξη των εσωτερικών τοιχίων κατά τρόπο τέτοιο ώστε να δημιουργείται μπρος-πίσω ροή και όχι πάνω – κάτω (διαδοχική υποχειλίση – υπερχειλίση).

Στη συνέχεια πραγματοποιήθηκε η πρόβλεψη της ροής, στην πραγματική διαμόρφωση της δεξαμενής του Σχήματος 7.5, αρχικά με ένα απλό μηδενικής εξίσωσης μοντέλο μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος, για τον υπολογισμό των τυρβωδών τάσεων και ενός ανάντη πρώτης τάξεως σχήματος διακριτοποίησης για τον υπολογισμό των όρων συναγωγής, σε ένα σχετικά αραιό πλέγμα. Στη συνέχεια το ίδιο μοντέλο χρησιμοποιήθηκε σε ένα πολύ πιο πυκνό πλέγμα. Τα αποτελέσματα των FTC καμπυλών για το αραιό και το πυκνό πλέγμα ήταν σε πολύ καλή συμφωνία μεταξύ τους, γεγονός που κατέδειξε πως για το αρχικό μοντέλο το σφάλμα από τη χρήση ενός αραιού πλέγματος ήταν ανεκτό.

Κατόπιν πραγματοποιήθηκε μια σύγκριση των πειραματικών και αριθμητικά υπολογιζόμενων καμπυλών συγκέντρωσης – χρόνου (Flow through curves – FTC), χρησιμοποιώντας διάφορους συνδυασμούς διαφορικών σχημάτων και μοντέλων τύρβης στην πρόβλεψη των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών (βλ. Πίνακα 7.1 - πρώτη στήλη επίλυση εξισώσεων κίνησης), κατ' αντιστοιχία με την εργασία των Wang & Falconer, (1998a) που παρουσιάστηκε παραπάνω. Το κεντρικό συμπέρασμα ότι η κορυφή της καμπύλης έχει γενικά υποεκτιμηθεί για όλες τις περιπτώσεις εκτός από την περίπτωση του k- ε μοντέλου, επιβεβαιώθηκε και πάλι, αυτή τη φορά σε μια διαφορετική γεωμετρία, από αυτή που είχαν εξετάσει οι Wang & Falconer (1998a), αυτή του Σχήματος 7.5. Όσον αφορά το χρόνο για τον οποίο η μέγιστη συγκέντρωση εξέρχεται της δεξαμενής παρατηρήθηκαν διάφορες αποκλίσεις. Για την νότια δεξαμενή (south tank) του Σχήματος 7.5, όλα τα μοντέλα προέβλεψαν μικρούς χρόνους, σημαντικά μικρότερους από τον μετρούμενο. Αντίθετα, για τη βόρεια δεξαμενή (north tank) το Smagorinsky μοντέλο έδωσε μια πολύ καλή πρόβλεψη του χρόνου, με το k – ε μοντέλο να παρουσιάζει ένα μέγιστο χρόνο με αρκετή καθυστέρηση, όπως συνέβη και στην εργασία των Wang & Falconer, (1998a) που παρουσιάστηκε παραπάνω. Η ασυμβατότητα πάντως των αποτελεσμάτων για τις δύο διαφορετικές δεξαμενές επαφής πηγάζει κύρια από το γεγονός ότι η προσομοίωση της ροής του νερού σε δεξαμενές αυτού του τύπου, με τη χρήση μοντέλων τύρβης όπως το k – ε και το Smagorinsky, επηρεάζεται έντονα από τις οριακές συνθήκες, που συνδέονται με τα ενδιάμεσα διαχωριστικά τοιχία και τους βυθισμένους υπερχειλιστές, τα οποία με τη σειρά τους συνάγουν στη διαμόρφωση ενός σύνθετου πεδίου ροής και μιας σύνθετης τυρβώδους δομής κοντά στην

είσοδο. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται από την έντονα ασύμμετρη μορφή των προβλεπόμενων FTC καμπυλών. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι η χρήση του απλού μηδενικής εξίσωσης μοντέλου μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος σε συνδυασμό με ένα ανάντη τρίτης τάξης διαφορικό σχήμα, έδωσε ακριβή πρόβλεψη τόσο για το χρόνο όσο και για τη μέγιστη συγκέντρωση και για τις δύο δεξαμενές (north & south).

Τέλος, μελετήθηκε η επίδραση της χρήσης διαφορετικών μοντέλων τύρβης στην προσομοίωση της μεταβολής των συγκεντρώσεων του χλωρίου και των μικροοργανισμών εντός της δεξαμενής του Σχήματος 7.5, μετά την πάροδο ενός συγκεκριμένου χρονικού διαστήματος (31 min) για μια συνεχή έγχυση χλωρίου στην είσοδο (0,1 mg/l). Αρχικά χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο μήκους ανάμιξης και το ανάντη πρώτης τάξης σχήμα. Το προβλεπόμενο προφίλ των συγκεντρώσεων του χλωρίου και των μικροοργανισμών, έδειξε μια σχεδόν πλήρη ομοιόμορφη και ισόποση κατανομή του χλωρίου σχεδόν σε όλη τη δεξαμενή, με το υπολειπόμενο ποσοστό των βακτηρίων από την άλλη να παρουσιάζει μια σχετική ομοιογένεια σε όλα σημεία της δεξαμενής, εκτός από τα σημεία εισόδου. Η ομοιογένεια αυτή οφείλεται στη αδυναμία του απλού μηδενικής εξίσωσης μοντέλου μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος να προβλέψει τα πεδία ανακυκλοφορίας της ροής. Στη συνέχεια χρησιμοποιήθηκε το $k - \varepsilon$ μοντέλο διατηρώντας και πάλι το ανάντη πρώτης τάξης σχήμα διακριτοποίησης. Στην περίπτωση αυτή παρατηρήθηκε πλέον μια ποικιλία στις συγκεντρώσεις του χλωρίου εντός της δεξαμενής, με τις μικρότερες τιμές αυτού να εμφανίζονται στις περιοχές ανακυκλοφορίας της ροής (νεκρές ζώνες). Ως συνέπεια, οι συγκεντρώσεις των υπολειπόμενων βακτηρίων στις περιοχές αυτές ήσαν μεγαλύτερες από άλλα σημεία της δεξαμενής. Αυτό συνεπάγεται γενικά την ανάγκη μεγαλύτερων χρόνων επαφής για την επίτευξη του επιθυμητού ποσοστού απομείωσης των μικροοργανισμών.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η εργασία των **Shiono & Teixeira (2000)**, οι οποίοι μελετήσανε την τύρβη που αναπτύσσεται σε μια μαιανδροειδή δεξαμενή επαφής και συγκεκριμένα στη δεξαμενή του Σχήματος 7.1. Αρχικώς, καθορίστηκαν οι περιοχές της ροής που διέπονται από σημαντικά ποσά τύρβης και εν συνεχεία αναλύθηκαν τα αίτια που τη δημιουργούν ανά περιοχή.

Πιο αναλυτικά, ο μεγαλύτερος βαθμός τύρβης παρουσιάστηκε στην περιοχή μεταξύ του υπερχειλιστή εισόδου και του θαλάμου εισροής, κυρίως εξαιτίας των έντονων ανακυκλοφοριών που παρουσιάζει η ροή στην περιοχή αυτή. Το ποσό της τύρβης εξακολουθεί να είναι σημαντικό στο πάνω τμήμα της ροής του διαμερίσματος 1. Το μέγεθος και η κατανομή των κανονικοποιημένων τάσεων Reynolds επισημαίνουν ότι η διάτμηση αποτελεί ένα σημαντικό χαρακτηριστικό γνώρισμα της ροής στην περιοχή αυτή. Συνεπώς, η

τύρβη σε αυτό το στρώμα της ροής μπορεί να θεωρηθεί ότι προέρχεται τοπικά από τη διάτμηση (shear generated) καθώς και από τη μεταφορά της τύρβης από την υπερχειλίση εισόδου στο θάλαμο εισροής. Επιπρόσθετα, για το διαμέρισμα αυτό, η τύρβη γειτονικά του τοιχώματος (wall generated) θεωρείται αξιόλογη.

Εν συνεχεία, οι περιοχές του διαμερίσματος 2 για τις οποίες διαγνώστηκαν τα μεγαλύτερα επίπεδα τύρβης, περιορίστηκαν στο πρώτο μισό του μήκους του διαμερίσματος αυτού. Τα υψηλά αυτά επίπεδα τύρβης αντιστοιχούν στις οριζόντιες ανακυκλοφορίες της ροής στα υψηλότερα και στα μεσαία στρώματα της ροής καθώς και στην περιοχή του πυθμένα αμέσως μετά από το εσωτερικό διαχωριστικό τοίχιο του διαμερίσματος 1 (στο πίσω μέρος του διαχωριστικού τοιχίου προς την διεύθυνση της ροής). Η αιτία ανάπτυξης σημαντικών ποσοστών τύρβης στον πυθμένα δείχνει να είναι η τύρβη που αναπτύσσεται εξαιτίας της εκτροπή της ροής από το διαχωριστικό τοίχιο. Γενικά, η τύρβη στις περιοχές αυτές ανακυκλοφοριών (υψηλότερα και μεσαία στρώματα της ροής) οφείλεται μερικώς στην διάτμηση. Επιπλέον, μια άλλη πηγή γέννησης της τύρβης σε αυτά τα σημεία αποτελεί η αλληλεπίδραση της αντίστροφης ροής με την κύρια ροή, γεγονός που υποδηλώνει επίσης ότι η επίτευξη εμβολικής ροής στο διαμέρισμα αυτό είναι αδύνατο να επιτευχθεί εξαιτίας της έντονης τοπικής ανάμιξης.

Η μέση ροή στα ανώτερα και κατώτερα στρώματα των διαμερισμάτων 3 και 4 είναι μεγάλη εξαιτίας της εκτροπής της ροής στα τοιχώματα. Η τάση αυτή τείνει να εξαφανιστεί κατά μήκος της δεξαμενής και η ροή του κατακόρυφου επιπέδου στην κεντρική γραμμή του διαμερίσματος τείνει να γίνει λιγότερο ή περισσότερο ομοιόμορφη από το διαμέρισμα 4 και μετά. Κατόπιν παρατηρείται μια συνεχής απομείωση των επιπέδων της τύρβης στην κατά μήκος κατεύθυνση. Η ένταση της τύρβης στο διαμέρισμα 4 γίνεται σχεδόν ομοιόμορφη και διανέμεται στο κατακόρυφο επίπεδο. Στη συνέχεια η τύρβη από το διαμέρισμα 5 και μετά τείνει να διατηρείται εξαιτίας δύο άλλων μηχανισμών γέννησης τύρβης, που είναι η επιτάχυνση-επιβράδυνση στις γειτονικές περιοχές μεταξύ των διαμερισμάτων και οι ανακυκλοφορίες της ροής στα σημεία πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία.

Το κεντρικό συμπέρασμα που εξάγεται από την εργασία αυτή είναι ότι η ροή σε μια τέτοια δεξαμενή επαφής είναι έντονα τριών διαστάσεων στις περιοχές της εισόδου, του πρώτου και του δευτέρου διαμερίσματος και της περιοχής της εξόδου, ενώ είναι εξαιρετικά μικρής σημασίας η ανάλυση στις τρεις διαστάσεις για τα υπόλοιπα τμήματα της δεξαμενής. Το συμπέρασμα αυτό έρχεται να επιβεβαιώσει και να ερμηνεύσει τα αποτελέσματα της εργασίας των Falconer & Ismail (1997), που αναλύθηκε παραπάνω (αδυναμία του μέσου βάθους 2-D μοντέλου να αποδώσει ρεαλιστικά τη ροή στα πρώτα διαμερίσματα της

δεξαμενής) καθώς και της εργασίας του Wang (1995), ο οποίος χρησιμοποιώντας επίσης ένα μέσο βάθους 2-D μοντέλο, (με τη διαφορά της χρήσης του k-ε μοντέλου και όχι του απλού μηδενικής εξίσωσης μοντέλου μήκους ανάμιξης με χαρακτηριστικό μήκος το μέσο βάθος) παρατήρησε σημαντική ανακολουθία μεταξύ μετρούμενων και υπολογιζόμενων τιμών στα διαμερίσματα 1 έως και 3.

Από τα παραπάνω είναι εμφανής η ανάγκη ανάπτυξης ενός τρισδιάστατου (3-D) αριθμητικού μοντέλου, για την βελτίωση της ικανότητας πρόβλεψης της ροής σε μαιανδροειδείς δεξαμενές επαφής-χλωρίωσης.

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ**8. ΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΣΕ ΔΥΟ & ΤΡΕΙΣ ΔΙΑΣΤΑΣΕΙΣ –
ΕΛΕΓΧΟΣ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ****8.1. Συνοπτική περιγραφή λειτουργίας δεξαμενής χλωρίωσης**

Η δεξαμενή χλωρίωσης, η προσομοίωση της οποίας αποτέλεσε το αντικείμενο μελέτης της παρούσας εργασίας, αποτελεί τμήμα της εγκατάστασης επεξεργασίας λυμάτων που πρόκειται να κατασκευαστεί στο Δήμο Φαρσάλων. Η γενική διάταξη των έργων παρουσιάστηκε στο σχήμα 2.4. Η μέθοδος επεξεργασίας που θα εφαρμοστεί στην ΕΕΛ του Δήμου Φαρσάλων βασίζεται στο σύστημα ενεργού ιλύος με παρατεταμένο αερισμό, με πλήρη σταθεροποίηση της ιλύος, υψηλό βαθμό νιτροποίησης - απονιτροποίησης και βιολογική απομάκρυνση του αζώτου. Η απολύμανση των εξερχόμενων υγρών γίνεται με τη χρήση συστήματος χλωρίωσης - αποχλωρίωσης, ενώ η επεξεργασία της λάσπης πραγματοποιείται με μηχανικά μέσα.

Τη μονάδα απολύμανσης αποτελούν η δεξαμενή χλωρίωσης, το συγκρότημα δοσομέτρησης του χλωρίου, ο μετρητής υπολειμματικού χλωρίου, το φρεάτιο αποχλωρίωσης, ο αναδευτήρας αποχλωρίωσης, το συγκρότημα δοσομέτρησης του διαλύματος NaHSO_3 και το κτίριο χημικών.

Πιο αναλυτικά, τα διαυγασμένα υγρά που υπερχειλίζουν από τις δεξαμενές καθίζησης καταλήγουν σε κανάλι μέτρησης της παροχής τύπου Parshall και από εκεί σε δεξαμενή χλωρίωσης μαιανδροειδούς διαμόρφωσης, για την απολύμανσή τους, πριν την διοχέτευσή τους στον αποδέκτη. Η δεξαμενή διαστασιολογήθηκε για ελάχιστο χρόνο επαφής των λυμάτων με το χλώριο 30 min, για την παροχή αιχμής. Η δεξαμενή χλωρίωσης έχει μέγιστο ωφέλιμο βάθος 2 m, είναι επιμήκης και φέρει εσωτερικά τοιχία για την μεγιστοποίηση της διαδρομής των υγρών (μαιανδρική). Το απαιτούμενο συνολικό μήκος διαδρομής των λυμάτων προς το πλάτος της δημιουργούμενης διώρυγας είναι $> 40:1$. Μετά την έξοδο από το μετρητή παροχής καναλιού τύπου Parshall τα λύματα οδηγούνται στο φρεάτιο τροφοδοσίας – παράκαμψης της δεξαμενής χλωρίωσης. Από εκεί μέσω κατάλληλου χειροκίνητου θυροφράγματος εισέρχονται πλευρικά στη δεξαμενή χλωρίωσης και συγκεκριμένα στο θάλαμο αρχικής ανάμιξης της δεξαμενής. Η διατομή εισόδου είναι $0,4 \times 0,8$ m. Το φρεάτιο αρχικής ανάμιξης διαστάσεων $(1,0 \times 1,2$ m) αποσκοπεί στην καλύτερη και άμεση ανάμιξη του προστιθέμενου απολυμαντικού μέσου με την κυρίως μάζα των δευτεροβάθμια

επεξεργασμένων λυμάτων. Στο φρεάτιο ανάμιξης γίνεται η προσθήκη του διαλύματος υποχλωριώδους νατρίου (NaOCl), περιεκτικότητας 14 %, ενώ η επικοινωνία του με το κυρίως τμήμα της δεξαμενής χλωρίωσης θα γίνεται μέσω οπής κοντά στον πυθμένα, για να επιτυγχάνεται καλύτερη διασπορά του διαλύματος στον όγκο των λυμάτων. Η υποβρύχια οπή επικοινωνίας (υποχείλιση) έχει διαστάσεις $M*Y - 1,20*0,50 \text{ m}$.

Το συγκρότημα του χλωριωτή αποτελείται από δύο δοσομετρικές αντλίες (μία σε λειτουργία και μία εφεδρική), οι οποίες διαστασιολογήθηκαν για την παροχή αιχμής, συνοδευόμενες με τις απαραίτητες σωληνώσεις και δικλείδες απομόνωσης στην κατάθλιψη, βαλβίδες αντεπιστροφής και ποδοβαλβίδες. Υπάρχει δυνατότητα ρύθμισης της παροχής από 0 – 100% της ονομαστικής παροχής της αντλίας μέσω κατάλληλου συστήματος αυτοματισμού (inverter) που δέχεται σήματα από το μετρητή παροχής της εγκατάστασης ή/και το μετρητή υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο της δεξαμενής.

Για την αποθήκευση του χλωριωτικού διαλύματος χρησιμοποιείται μία δεξαμενή (κυλινδρική, κατακόρυφης τοποθέτησης) εξοπλισμένη με κατάλληλα στηρίγματα, ηλεκτρόδιο στάθμης, εξοπλισμό εκκένωσης, αναμονή υπερχειλίσης και σύστημα πλήρωσης με κατάλληλη αναμονή για τροφοδοσία από βυτιοφόρο, ικανή να αποθηκεύσει το απαιτούμενο διάλυμα NaOCl για περισσότερο από 20 ημέρες, δυναμικότητας 5000 lt, από γραμμικό πολυαιθυλένιο.

Στο φρεάτιο εξόδου της απολύμανσης τοποθετείται ο μετρητής υπολειμματικού χλωρίου. Ο μετρητής αποτελείται από το αισθητήριο χώρου, τον πομπό σήματος και το όργανο στιγμιαίας ένδειξης της συγκέντρωσης του χλωρίου.

Μετά τη δεξαμενή χλωρίωσης, τα υγρά υπερχειλίζουν, μέσω ορθογωνικού υπερχειλιστή με πλάτος 1,2 m, στη δεξαμενή αποχλωρίωσης. Η αποχλωρίωση των λυμάτων θα επιτυγχάνεται με προσθήκη διαλύματος όξινου θειώδους νατρίου (NaHSO_3) περιεκτικότητας 30% σε ενεργό NaHSO_3 , με κατάλληλες δοσομετρικές αντλίες. Για την καλή ανάμιξη των υγρών με το διάλυμα NaHSO_3 θα τοποθετηθεί αναδευτήρας στο φρεάτιο αποχλωρίωσης. Η παρασκευή του διαλύματος NaHSO_3 θα γίνεται σε ανοξείδωτο δοχείο, το οποίο θα διαθέτει αναδευτήρα και κοχλία δοσομέτρησης του στερεού χημικού. Με τη βοήθεια ηλεκτροβάνας παροχετεύεται στο δοχείο το απαραίτητο νερό. Το δοχείο διαστασιολογήθηκε ώστε ο ωφέλιμος όγκος του διαλύματος να είναι 1000 λίτρα. Η τροφοδοσία του διαλύματος NaHSO_3 γίνεται από συγκρότημα δύο δοσομετρικών αντλιών (μία σε λειτουργία και μία εφεδρική) οι οποίες διαστασιολογήθηκαν για την παροχή αιχμής. Υπάρχει δυνατότητα ρύθμισης της παροχής από 0 – 100% της ονομαστικής παροχής της αντλίας μέσω κατάλληλου συστήματος αυτοματισμού που δέχεται σήμα από τη συσκευή

μέτρησης του υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο της δεξαμενής. Η λειτουργία των αντλιών εναλλάσσεται αυτόματα για ομοιόμορφη φθορά, ενώ σε περίπτωση βλάβης θα ξεκινά αυτόματα η εφεδρική. Τα συστήματα χλωρίωσης και αποχλωρίωσης εγκαθίστανται σε κτίριο. Μετά την αποχλωρίωση τα επεξεργασμένα πλέον υγρά υπερχειλίζουν προς τη δεξαμενή μεταερισμού.

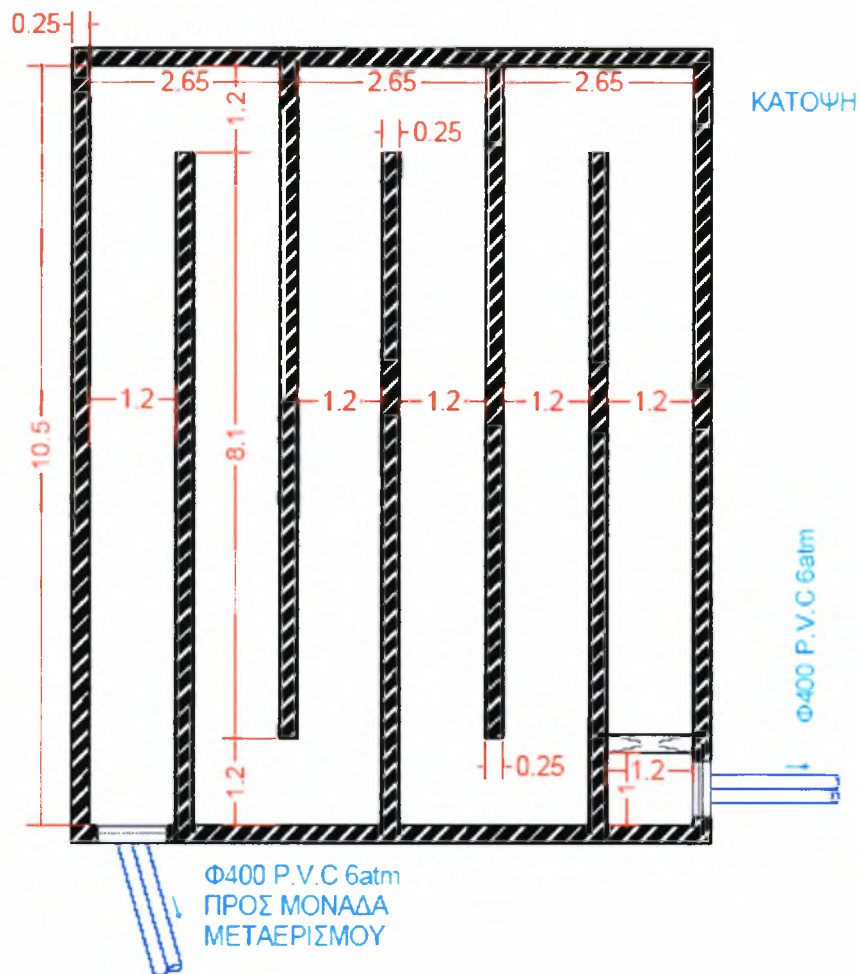
Η δόση του διαλύματος θα ρυθμίζεται σύμφωνα με τις ενδείξεις του οργάνου μέτρησης του υπολειμματικού χλωρίου. *Η συγκέντρωση του χλωρίου στην έξοδο θα είναι μικρότερη από 0,3 mg/l.*

8.2. Γεωμετρικά χαρακτηριστικά της δεξαμενής χλωρίωσης

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται η ακριβής γεωμετρία της δεξαμενής απολύμανσης που μελετάται, βάση των κατασκευαστικών σχεδίων αυτής. Η αποτύπωση των γεωμετρικών διαστάσεων έγινε με τη βοήθεια του σχεδιαστικού πακέτου AUTO-CAD της Autodesk.Οι βασικές διαστάσεις της υπό εξέταση δεξαμενής χλωρίωσης καθώς και οι βασικοί παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν για το σχεδιασμό αυτής συνοψίζονται στον Πίνακα 8.1, ενώ στο Σχήμα 8.1 δίνεται μια τυπική κάτοψη της δεξαμενής επαφής που μελετάται.

Πίνακας 8.1: Βασικές διαστάσεις της υπό εξέταση δεξαμενής και σχεδιαστικοί παράμετροι

Α. Βασικές Διαστάσεις	
▼ Δεξαμενή χλωρίωσης	
✕ Πλήθος δεξαμενών	: 1
✕ Μήκος διαδρόμου	: 10,50 m
✕ Πλήθος διαδρόμων	: 6
✕ Πλάτος διαδρόμου	: 1,20 m
✕ Βάθος υγρών στο διάδρομο	: 2,00 m
▼ Φρεάτιο αποχλωρίωσης	
✕ Μήκος θαλάμου	: 2,35 m
✕ Πλάτος θαλάμου	: 1,20 m
✕ Βάθος θαλάμου	: 1,80 m
✕ Αριθμός διαμερισμάτων	: 1
Β. Παράμετροι Σχεδιασμού	
Παροχή αιχμής	: 290 m ³ /hr
Χρόνος παραμονής σε παροχή αιχμής	: 30 min
Συγκέντρωση ολικών κολοβακτηριδίων πριν τη χλωρίωση	: 10 ⁷ Κολ/δια / 100 ml
Συγκέντρωση ολικών κολοβακτηριδίων μετά τη χλωρίωση	: 500 Κολ/δια / 100 ml
Μέγιστη αναλογία σε χλώριο	: 5 gr/m ³ λυμάτων
Μέγιστη συγκέντρωση Cl στην έξοδο της αποχλωρίωσης	: 0,3 mg/l



Σχήμα 8.1 : Τυπική κάτοψη της δεξαμενής χλωρίωσης που εξετάζεται

8.3. Παρουσίαση του 2D & 3D πλέγματος της υπό εξέταση γεωμετρίας

8.3.1. Σχήματα πλέξης

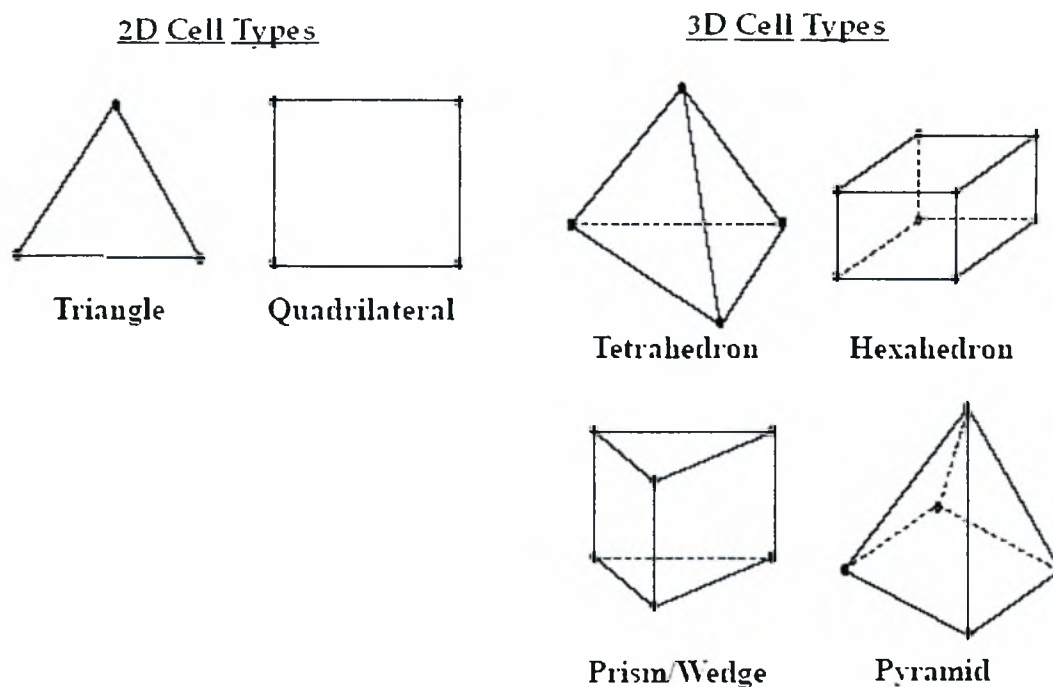
Η μεθοδολογία που ακολουθείται γενικώς για την κατασκευή ενός τρισδιάστατου πλέγματος, εφόσον έχει διαμορφωθεί το περίγραμμα του όγκου, απαιτεί την τοποθέτηση των κόμβων πρώτα στις οριακές γραμμές, μετά στην επιφάνεια που ορίζουν αυτές οι γραμμές και έπειτα στον όγκο που εσωκλείεται από όλες τις οριακές επιφάνειες. Η τοποθέτηση των κόμβων επάνω στις γραμμές που ορίζουν την διεπιφάνεια ορίου μπορεί να γίνει με μεταβλητή απόσταση, με σκοπό να δημιουργηθεί ανισοκατανεμημένο πλέγμα. Εφόσον, τοποθετηθούν οι κόμβοι επάνω στις γραμμές που ορίζουν την επιφάνεια, μπορεί να εφαρμοστεί ένα σχήμα πλέγματος και ταυτόχρονα να δημιουργηθούν και οι υπόλοιποι κόμβοι εντός της επιφάνειας. Μετά την εφαρμογή του πλέγματος στις επιφάνειες που περικλείουν τον υπολογιστικό όγκο, μπορεί να εφαρμοστεί κατάλληλο σχήμα ανά περίπτωση έτσι ώστε να δημιουργηθούν και οι

θέσεις των κόμβων στο εσωτερικό. Σε κάθε περίπτωση, υπάρχει η δυνατότητα της απευθείας εφαρμογής ενός πλέγματος σε ένα όγκο χωρίς να ακολουθείται η διαδικασία : διακριτοποίηση γραμμής, πλέξη εξωτερικών επιφανειών και πλεγμάτωση όγκου. Αυτό βέβαια, περιορίζει τις δυνατότητες πύκνωσης και αραιώσης του πλέγματος σε περιοχές που χρήζουν κατάλληλης εστίασης.

Κατά τη δημιουργία πλέγματος επάνω σε μια ή και περισσότερες επιφάνειες, πρέπει να δηλωθούν στον προεπεξεργαστή, οι επιφάνειες πλέξης, το σχήμα πλέγματος και οι αποστάσεις των κόμβων του πλέγματος. Εφόσον γίνει η επιλογή της επιφάνειας, πρέπει στην συνέχεια να προσδιοριστεί το είδος των κελιών και ο τύπος του πλέγματος. Το είδος των κελιών ουσιαστικά αφορά το σχήμα των κελιών και ο τύπος του πλέγματος, το πρότυπο με το οποίο τα κελιά συνθέτουν την επιφάνεια.

Στο Σχήμα 8.2 παρουσιάζονται οι τύποι των κελιών που δύναται να εμφανιστούν στα πρότυπα σχήματα πλέγματος, που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή του πλέγματος της παρούσας εργασίας. Σε κάθε περίπτωση η επιλογή του σχήματος των κελιών καθορίζεται από τη γεωμετρία του όγκου μοντελοποίησης, από τον αλγόριθμο πλέξης που επιλέγεται, από την πυκνότητα των κελιών σε μια συγκεκριμένη υποπεριοχή, από τον αδιάστατο αριθμό CFL¹ και τέλος από την έκδοση του επιλύτη (solver) και από το σχήμα διακριτοποίησης.

¹Αριθμός CFL (Courant – Friedrich - Levy Number). Για διακριτοποιημένα προβλήματα μεταφοράς, ο αριθμός CFL καθορίζει πόσα κελιά διανύει (περνάει) ένα στοιχείο ρευστού κατά την διάρκεια ενός χρονικού βήματος ή αντίστοιχα το κλάσμα του χρόνου που απαιτείται για να περάσει από ένα κελί. Για ρητά σχήματα, όπως Runge-Kutta, ο αριθμός CFL πρέπει να είναι μικρότερος από το όριο ευστάθειας για να επιτευχθεί σύγκλιση. Για πεπλεγμένα και ημι-πεπλεγμένα σχήματα ο αριθμός CFL δεν συνιστά όριο ευστάθειας της λύσης, αλλά το εύρος των παραμέτρων εντός των οποίων αυτά τα σχήματα συγκλίνουν χαρακτηρίζεται συχνά από τον αριθμό CFL.

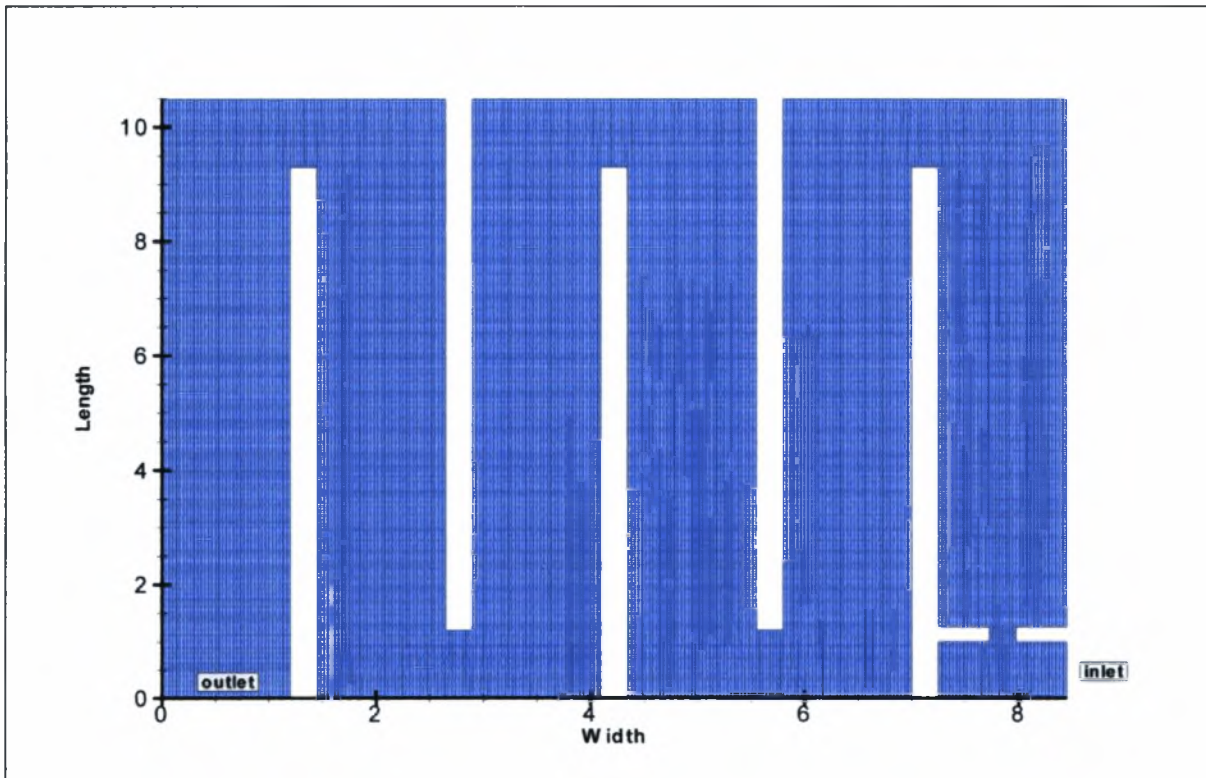


Σχήμα 8.2: Τύποι και είδη κελιών για την κατασκευή πλεγμάτων

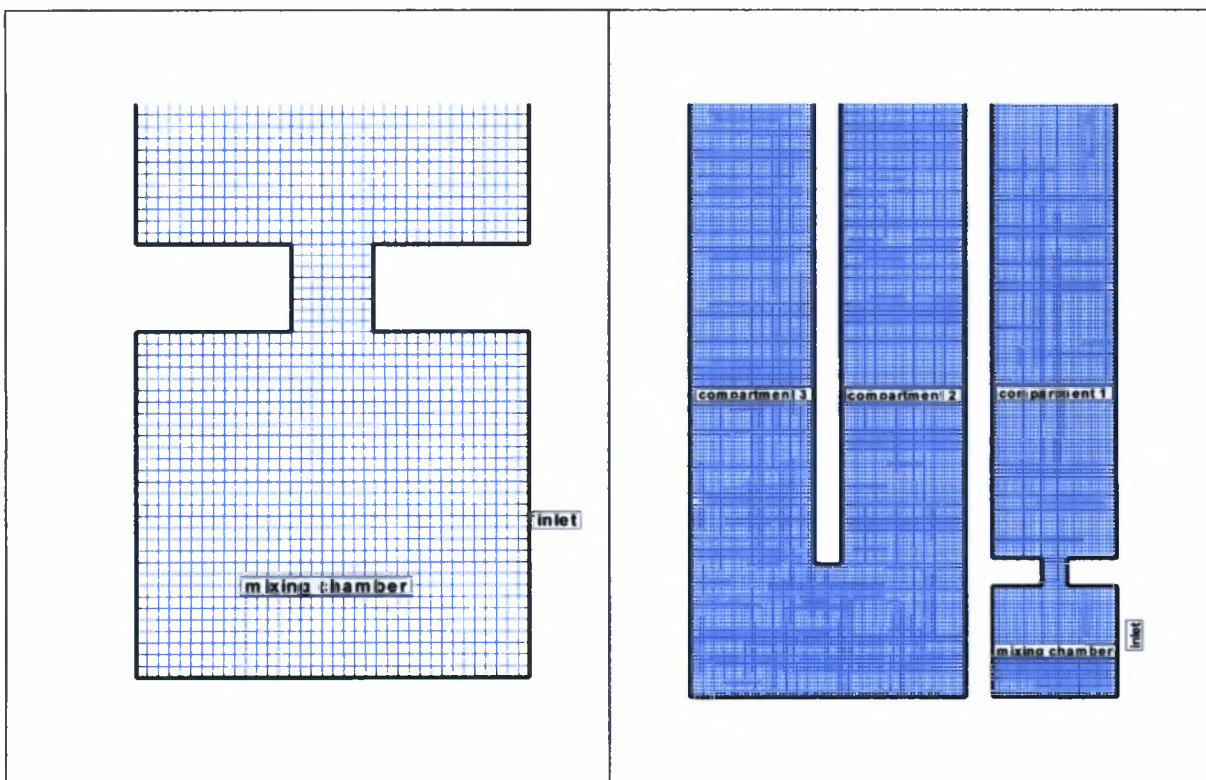
8.3.2. Πλέγματα προσομοιώσεων παρούσας εργασίας

Αρχικά χρησιμοποιήθηκε μια διδιάστατη γεωμετρία, σχετικά αραιού πλέγματος και εν συνεχεία έγινε μετάβαση στο τρισδιάστατο πλέγμα. Το διδιάστατο πλέγμα χρησιμοποιήθηκε με σκοπό την μελέτη της ροής (υδροδυναμική ανάλυση δεξαμενής επαφής) αλλά και της διεργασίας της απολύμανσης (απομείωση χλωρίου και απενεργοποίηση μικροοργανισμών) με απώτερο στόχο τον έλεγχο του μαθηματικού μοντέλου (πορεία επίλυσης του μοντέλου), που αναπτύχθηκε σε προηγούμενη ενότητα, αλλά και της συμπεριφοράς του επιλυτή (solver) του κώδικα.

Πιο αναλυτικά, τα αποτελέσματα του μαθηματικού μοντέλου και του υπολογιστικού κώδικα που εφαρμόστηκε, συγκρίθηκαν με τα αποτελέσματα παρόμοιων εργασιών (προσομοίωση της ροής και των φαινομένων μεταφοράς δεξαμενών χλωρίωσης, με τη χρήση ενός μέσου - βάθους (depth-average) διδιάστατου μοντέλου) που αναλύθηκαν εκτενώς στο Κεφάλαιο 7. Στα σχήματα που ακολουθούν δίνονται κάποιες λεπτομέρειες του διδιάστατου πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε. Επισημαίνεται πως για την καλύτερη προσέγγιση της πραγματικής γεωμετρίας της υπό εξέταση δεξαμενής χλωρίωσης, για την 2D περίπτωση, επιλέχθηκε η δημιουργία μιας στένωσης στο κατάντη τμήμα του θαλάμου αρχικής ανάμιξης.

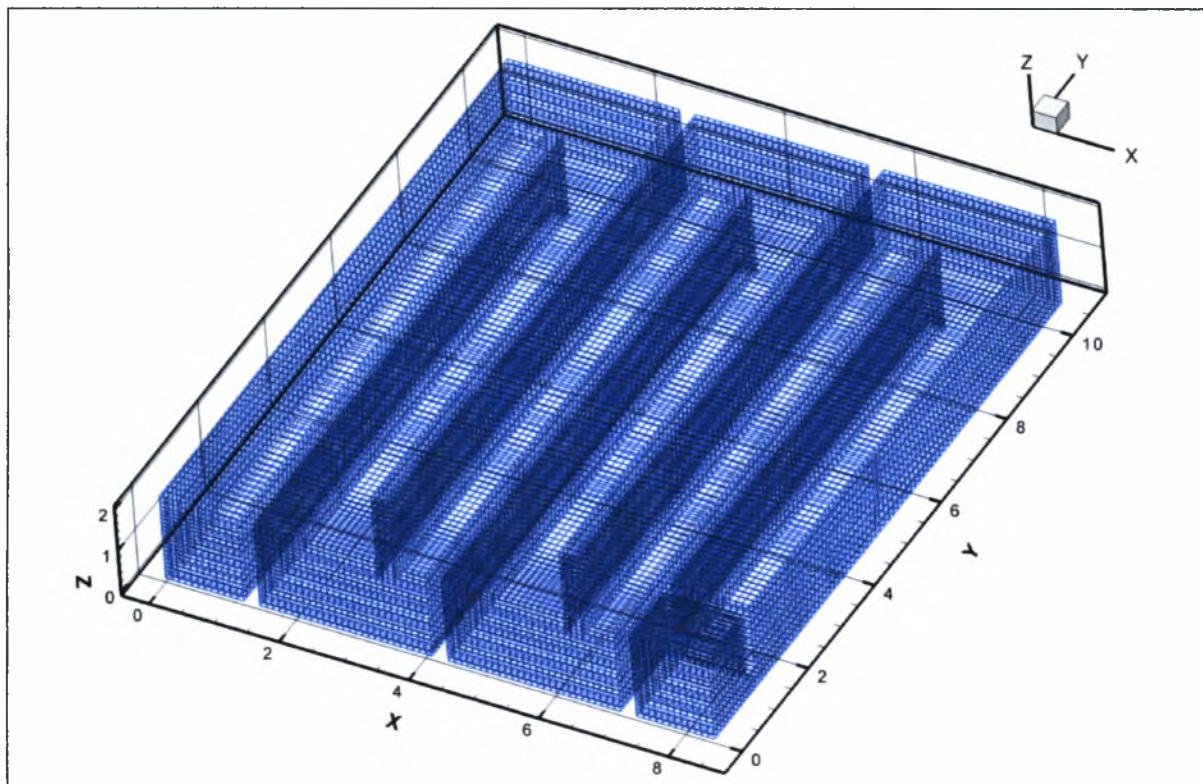


Σχήμα 8.3: Διδιάστατο πλέγμα (68.392 κελιά, 138.754 επιφάνειες, 70.363 κόμβοι)



Σχήμα 8.4: Λεπτομέρειες διδιάστατου πλέγματος (εισόδου, θαλάμου ανάμιξης, στένωσης και τριών πρώτων διαμερισμάτων)

Η επίλυση όλων των εξισώσεων ροής και μεταφοράς στο παραπάνω διδιάστατο πλέγμα κατέστησε την επαναληπτική διαδικασία επίλυσης λιγότερο χρονοβόρα, απ' ότι η επίλυση στο τρισδιάστατο πλέγμα, το οποίο παρουσιάζεται στη συνέχεια.



Σχήμα 8.5: Τρισδιάστατο πλέγμα της υπό εξέταση δεξαμενής (137.100 κελιά, 430.033 επιφάνειες, 156.455 κόμβοι)

8.4. Πορεία επίλυσης

Οι εξισώσεις του παρόντος μαθηματικού μοντέλου επιλύονται με την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο SIMPLEC. Η διακριτοποίηση των όρων συναγωγής στις εξισώσεις μεταφοράς της ορμής, της τύρβης και των συγκεντρώσεων γίνεται με σχήμα τρίτης τάξης MUSCL, ενώ για τους όρους διάχυσης χρησιμοποιούνται κεντρικές διαφορές. Οι εξισώσεις των συγκεντρώσεων επιλύονται εφόσον είναι γνωστά τα πεδία ταχυτήτων, της πίεσης και των μεγεθών της τύρβης, χωρίς να προκαλούν μεταβολές στις εξισώσεις κίνησης και στην αντίστοιχη της συνέχειας. Αυτό είναι δυνατό να συμβεί λόγω της εξαιρετικά μικρής μάζας του απολυμαντικού μέσου και του μικροβιακού φορτίου, σε σχέση με τα λύματα ($<0,01\%$), γεγονός που δεν προκαλεί προβλήματα στην ικανοποίηση στη συνέχεια της μάζας. Για τις προσομοιώσεις στις τρεις διαστάσεις χρησιμοποιήθηκε ένα δομημένο πλέγμα 137.100 κελιών που αποτελείται από 12 τμήματα (Blocks).

Για την είσοδο του ρευστού προσδιορίζονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet για τις ταχύτητες u , v , w , την κινητική ενέργεια της τύρβης k , την σκέδαση αυτής ϵ , τη συγκέντρωση του χλωρίου C και τη συγκέντρωση των μικροοργανισμών N . Ο προσδιορισμός των ταχυτήτων έγινε έμμεσα από τον κώδικα ώστε να αντιστοιχεί σε παροχή $290 \text{ m}^3/\text{hr}$. Ο καθορισμός των συνοριακών τιμών των k και ϵ έγινε για ένταση τύρβης $3,5 \%$ και για υδραυλική διάμετρο εισόδου $0,4$. Στα τοιχώματα εφαρμόστηκε η συνθήκη μη ολίσθησης για τα κινηματικά μεγέθη και η συνθήκη Neumann για τις συγκεντρώσεις χλωρίου και μικροοργανισμών. Στην έξοδο εφαρμόστηκε συνθήκη μηδενικής κλίσης για την πίεση και για τα βαθμωτά μεγέθη συγκεντρώσεων. Η ελεύθερη επιφάνεια των λυμάτων προσεγγίζεται με συνοριακή συνθήκη συμμετρίας. Όλα τα τμήματα αποτελούνται από εξαεδρικά κελιά τετραγωνικής ή ορθογωνικής διατομής. Οι προσομοιώσεις εκτελέστηκαν σε υπολογιστή PC με επεξεργαστή AMD Athlon64X2 5000, μνήμη 2Gb RAM, ενώ η τυπική διάρκεια εκτέλεσης για την τρισδιάστατη ανάλυση στη μόνιμη κατάσταση ήταν περίπου 2 ώρες.

8.5. Αποτελέσματα - Συζήτηση

Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων υποδιαιρείται σε τρεις ενότητες:

(i) Αρχικά, το μαθηματικό μοντέλο που παρουσιάστηκε αναλυτικά στο Κεφάλαιο 5, εφαρμόζεται στις δύο διαστάσεις με στόχο τον έλεγχο και την επιβεβαίωση του μαθηματικού μοντέλου (πορεία επίλυσης του μοντέλου και σύγκριση αποτελεσμάτων με ανάλογες εργασίες), την εξακρίβωση της υπολογιστικής ορθότητας και την κατανόηση της συμπεριφοράς του επιλυτή (solver) του κώδικα. Η αντιμετώπιση αυτή βοήθησε στο να διαμορφωθεί μια στρατηγική για την επίτευξη του τελικού στόχου.

(ii) Σε δεύτερη φάση, το επιβεβαιωμένο πλέον μαθηματικό μοντέλο (όπως προέκυψε από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων της διδιάστατης θεώρησης με ανάλογες εργασίες) εφαρμόστηκε στην πραγματική (τρειςδιάστατη) πλέον γεωμετρία της δεξαμενής χλωρίωσης που μελετάται. Αρχικά μελετήθηκε το πεδίο ροής και στη συνέχεια η μεταφορά/απομείωση του απολυμαντικού μέσου και η μεταφορά/απενεργοποίηση των μικροοργανισμών στη μόνιμη κατάσταση.

(iii) Σε τρίτη φάση, εξετάστηκε η επίδραση της κινητικής της απομείωσης του χλωρίου και της κινητικής της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών στην απόδοση της διεργασίας της χλωρίωσης, επίσης για τη μόνιμη κατάσταση. Για το λόγο αυτό μελετήθηκαν διαφορετικοί συνδυασμοί κινητικών μοντέλων για δεδομένο πεδίο ροής κάνοντας χρήση βιβλιογραφικών δεδομένων. Ο έλεγχος της ταύτισης ή απόκλισης των διαφόρων συνδυασμών

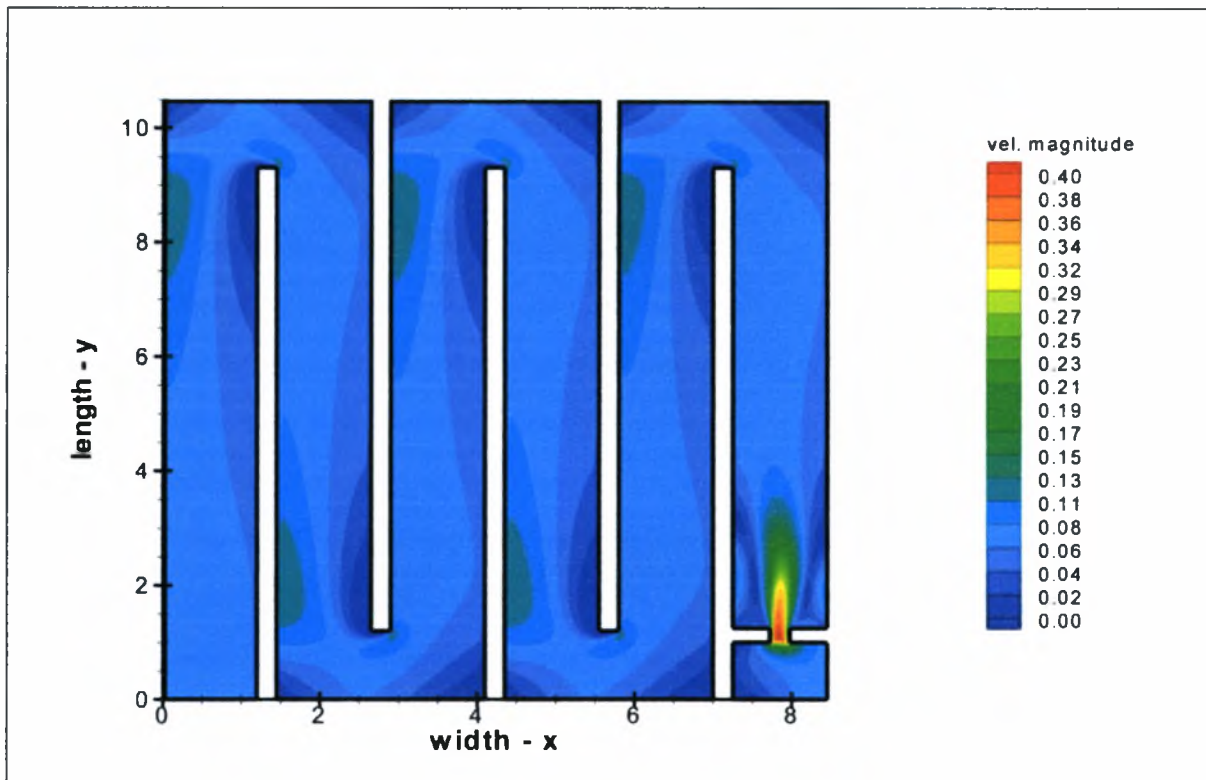
των κινητικών μοντέλων που χρησιμοποιήθηκαν, έγινε τόσο με βάση την αναμενόμενη εκροή σε χλώριο και μικροοργανισμούς (βάση του θεωρητικού σχεδιασμού της εν λόγω μονάδας) αλλά και βάση των στοιχείων από το πρόγραμμα λειτουργίας ανάλογων εγκαταστάσεων στον Ελλαδικό χώρο.

8.5.1. Διδιάστατη θεώρηση

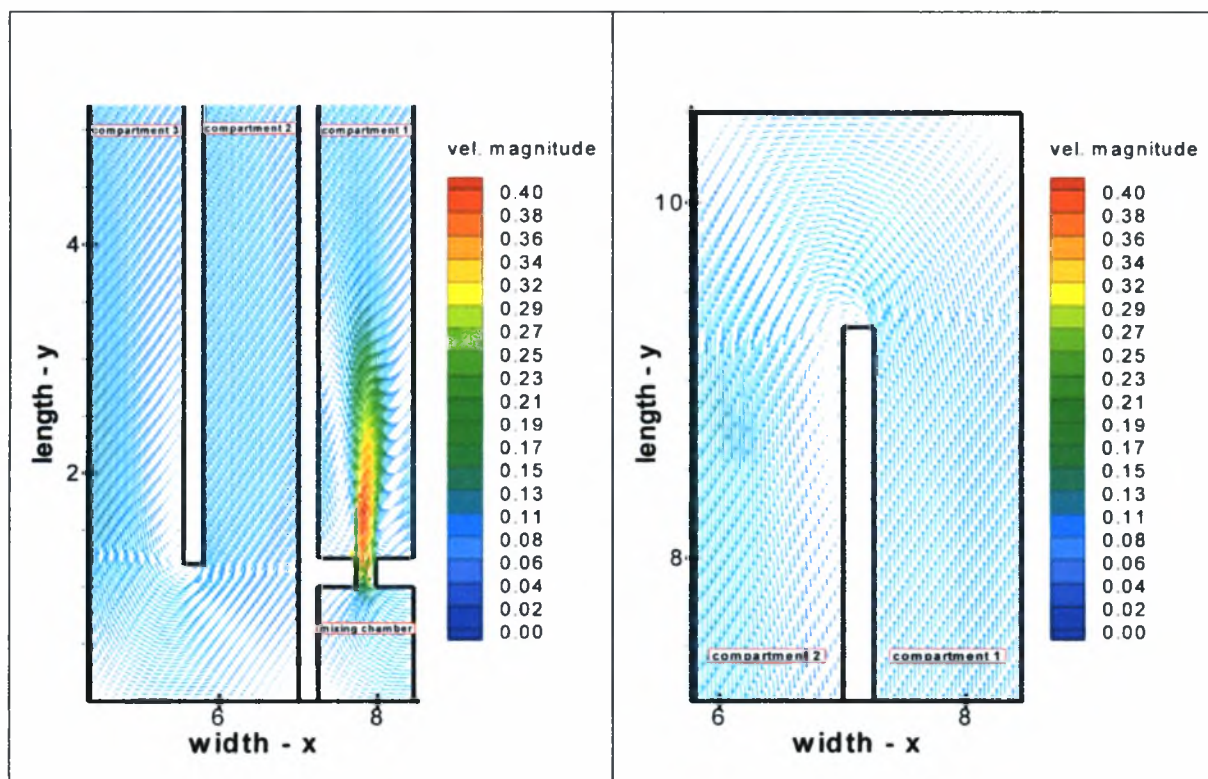
Η υδροδυναμική ανάλυση των δεξαμενών επαφής περιλαμβάνει όπως είδαμε στο Κεφάλαιο 7, ένα συνδυασμό ποικίλων μοντέλων τύρβης και αριθμητικών σχημάτων με σκοπό την καλύτερη δυνατή προσέγγιση των τυρβωδών τάσεων και των όρων συναγωγής. Στις προσομοιώσεις της παρούσας εργασίας, οι όροι των διατμητικών τάσεων εκφράστηκαν από το k-ε μοντέλο, ενώ η διακριτοποίηση των όρων συναγωγής έγινε με ένα ανάντη τρίτης τάξης διαφορικό σχήμα (Third order MUSCL) καθώς ο συνδυασμός αυτός έδωσε ιδιαίτερα ικανοποιητικά αποτελέσματα σε ανάλογες εργασίες.

Στο Σχήμα 8.6 παρουσιάζεται το συνολικό πεδίο της ροής, με απεικόνιση του μέτρου της ταχύτητας, όπου είναι εμφανής η ορθή απόδοση των ανακυκλοφοριών σε κάθε διάδρομο της δεξαμενής (στο πίσω μέρος των διαχωριστικών τοιχίων και στις γωνίες) αλλά και στο πρώτο διαμέρισμα της δεξαμενής αμέσως μετά τον θάλαμο αρχικής ανάμιξης. Στα σημεία αυτά η ταχύτητα σχεδόν μηδενίζεται. Επιπλέον, είναι εμφανής η ταύτιση των αποτελεσμάτων με τα αποτελέσματα ανάλογων εργασιών σε παραπλήσιες δεξαμενές χλωρίωσης (βλ. Κεφάλαιο 7).

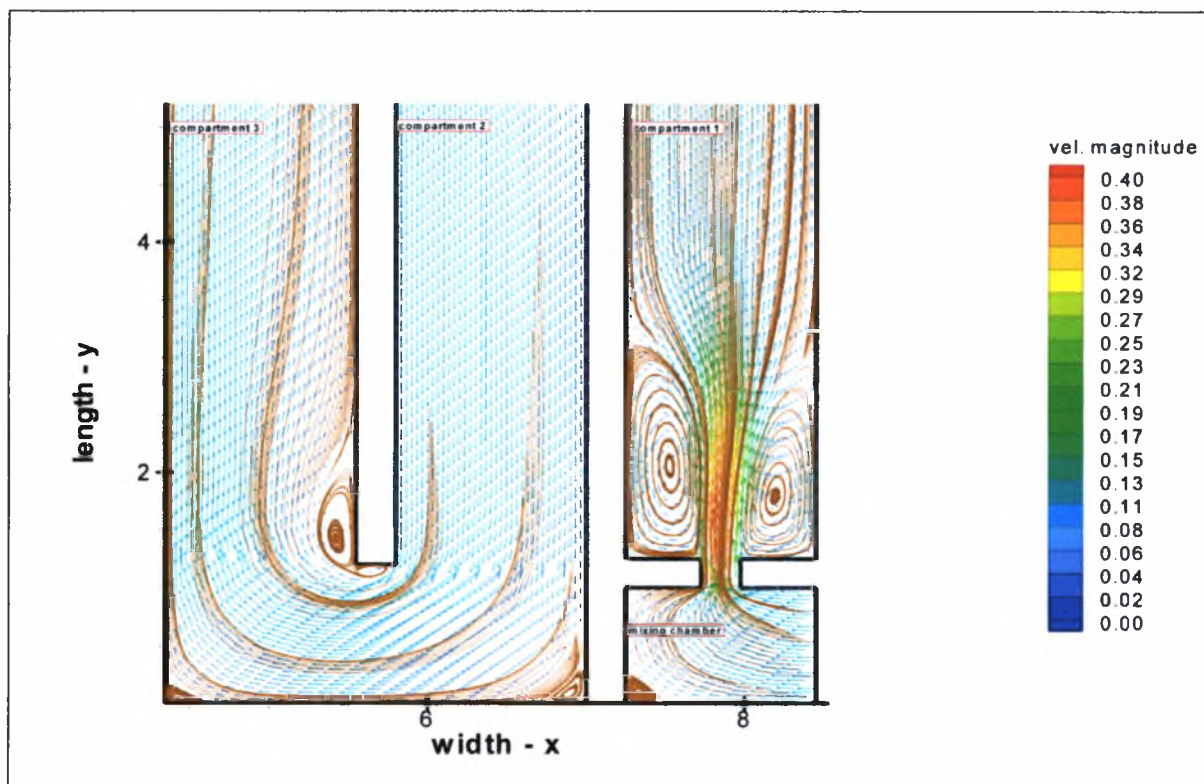
Όπως μπορεί κανείς να διαπιστώσει από την προσεχτική ανάλυση του Σχήματος 8.7, οι κύριες ζώνες ανακυκλοφορίας της ροής παρατηρούνται στα σημεία ένωσης των εξωτερικών τοιχίων της δεξαμενής με τα εσωτερικά διαχωριστικά τοιχία (γωνίες 90^0) καθώς και στο πίσω μέρος (προς την διεύθυνση της ροής) των εσωτερικών διαχωριστικών τοιχίων (baffles) και συγκεκριμένα στα σημεία αλλαγής της διεύθυνσης της ροής ως αποτέλεσμα της αποκόλλησης της ροής. Η έκταση των προβλεπόμενων ανακυκλοφοριών είναι πιο έντονη στα σημεία πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία και μικρότερη στις ορθές γωνίες στην αρχή και στο τέλος κάθε διαμερίσματος. Οι ανακυκλοφορίες αυτές αντιστοιχούν σε νεκρές ζώνες οι μεγαλύτερες από τις οποίες έχουν σημαντική επίπτωση στην απόδοση των δεξαμενών επαφής καθώς οδηγούν σε σημαντική απόκλιση από την εμβολική ροή. Για την ακόμη καλύτερη απεικόνιση των ανακυκλοφοριών στο Σχήμα 8.8 παρουσιάζεται σε μεγέθυνση ο θάλαμος αρχικής ανάμιξης και τα τρία πρώτα διαμερίσματα της δεξαμενής επαφής και δίνονται οι ροϊκές γραμμές.



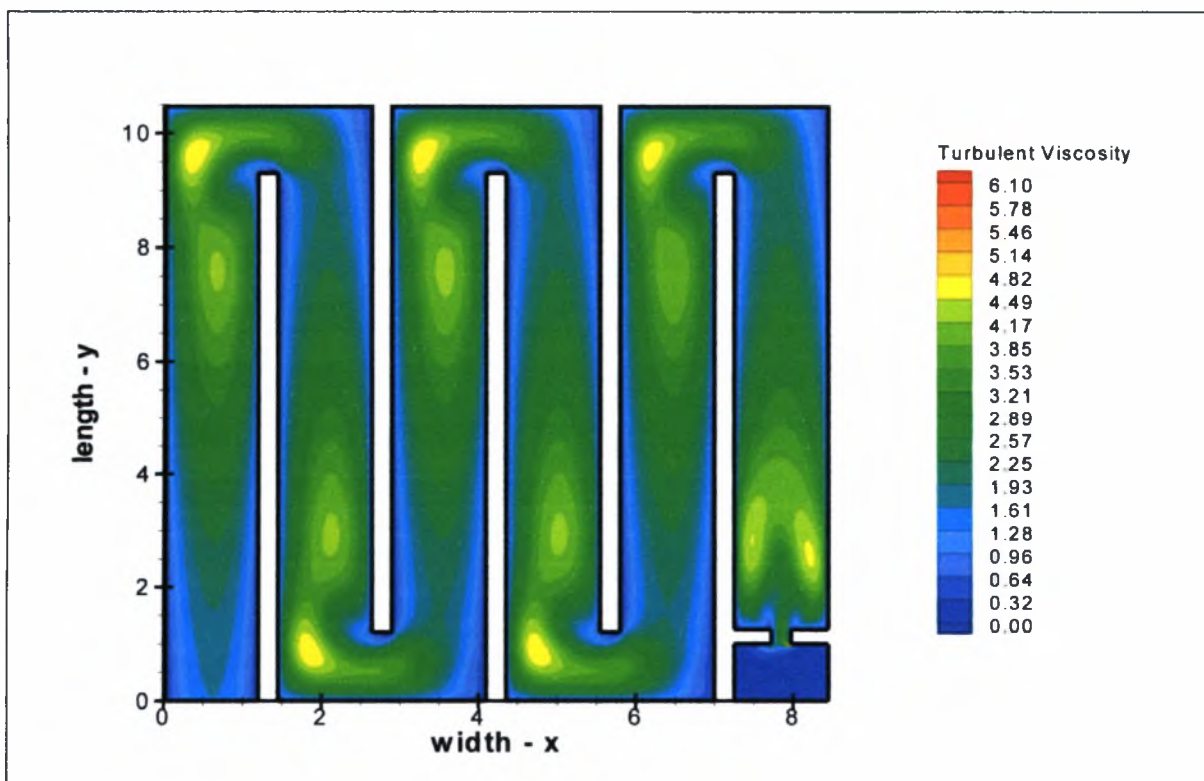
Σχήμα 8.6: Πεδίο ροής (κατανομή των ταχυτήτων)



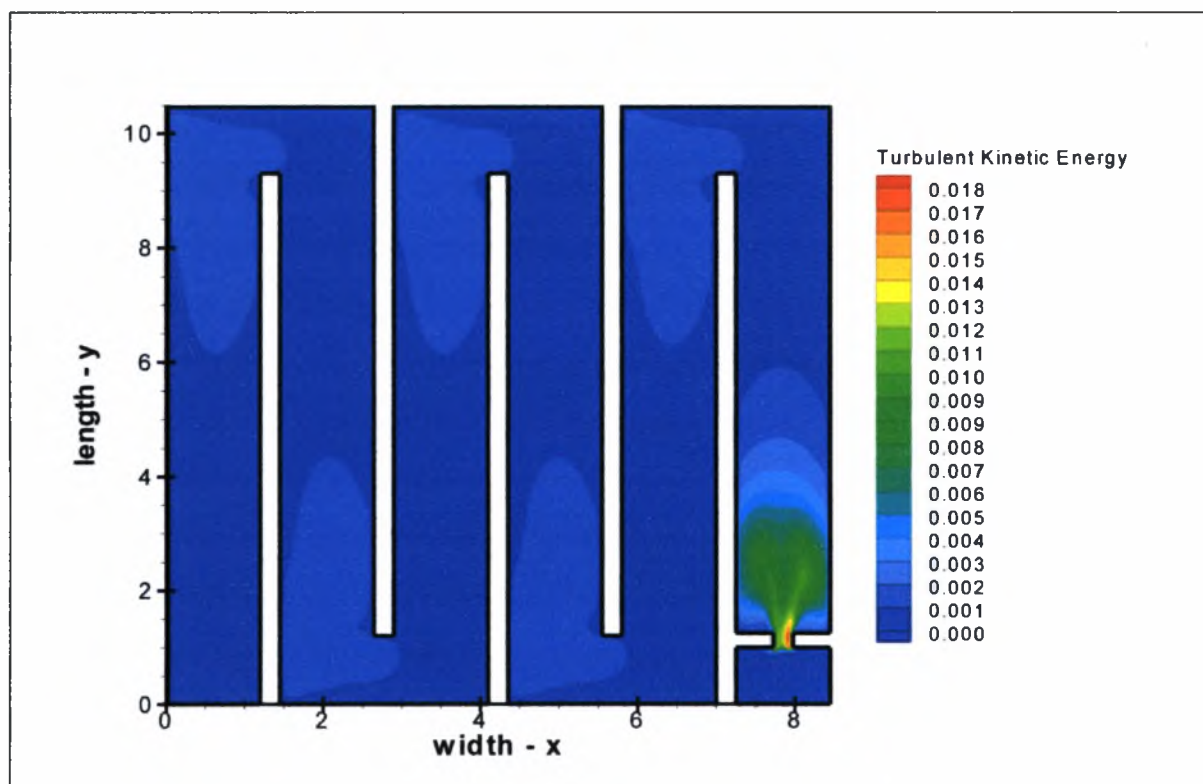
Σχήμα 8.7: Διανύσματα ταχυτήτων (λεπτομέρεια θαλάμου αρχικής ανάμιξης και τριών πρώτων διαμερισμάτων της δεξαμενής)



Σχήμα 8.8: Διανύσματα ταχυτήτων και ροϊκές γραμμές για την ευκρινέστερη απόδοση των ανακυκλοφοριών.



Σχήμα 8.9: Κατανομή του μέτρου του τυρβώδους ιξώδους

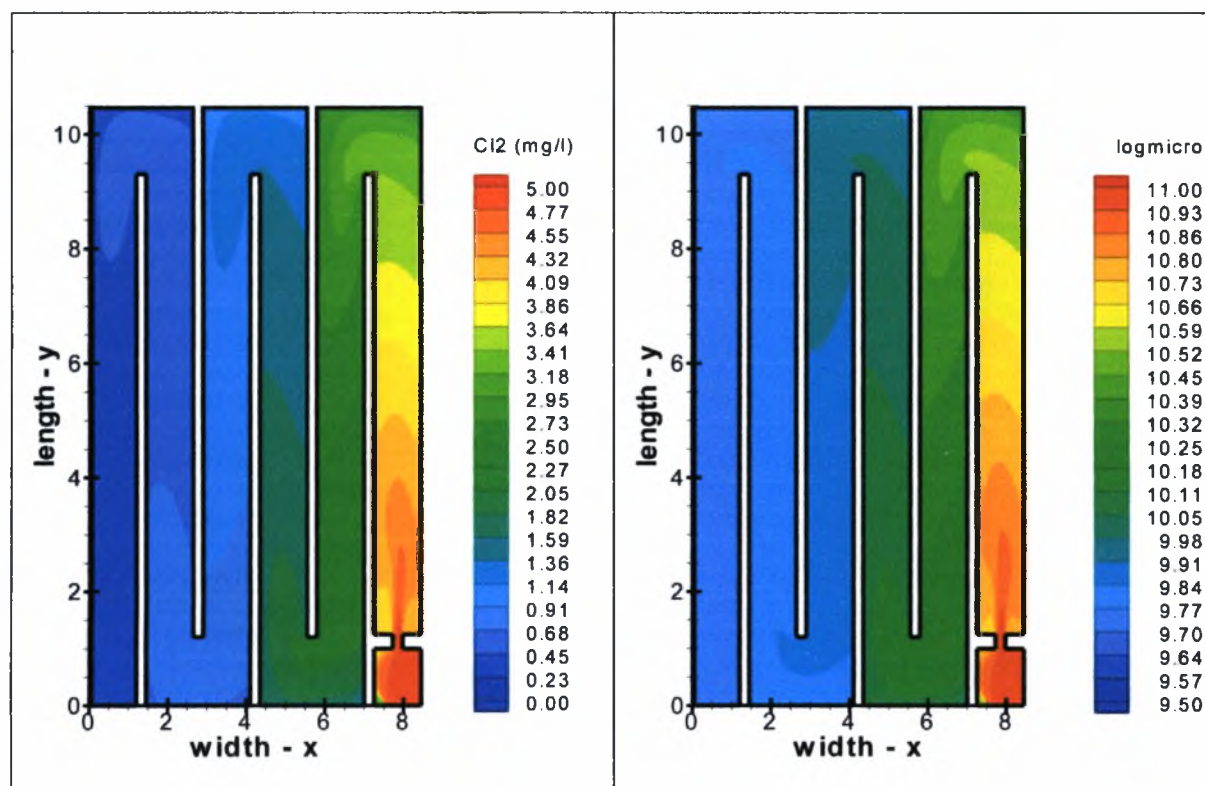


Σχήμα 8.10: Κατανομή του μέτρου της κινητικής ενέργειας της τύρβης

Από την παρατήρηση των Σχημάτων 8.9 και 8.10 διαπιστώνεται ότι η μεγαλύτερη ένταση τύρβης παρουσιάστηκε στην περιοχή μεταξύ του θαλάμου αρχικής ανάμιξης και του πρώτου διαμερίσματος της δεξαμενής, κυρίως εξαιτίας των έντονων ανακυκλοφοριών που παρουσιάζει η ροή στην περιοχή αυτή. Εν συνεχεία, οι περιοχές στις οποίες διαγνώστηκαν χαμηλότερα επίπεδα τύρβης, είναι αμέσως μετά από το εσωτερικά διαχωριστικά τοιχεία (στο πίσω μέρος των διαχωριστικών τοιχείων προς την διεύθυνση της ροής) εξαιτίας της εκτροπής της ροής από το διαχωριστικό τοίχιο. Η πηγή παραγωγής της τύρβης σε αυτά τα σημεία είναι η αλληλεπίδραση της αντίστροφης ροής με την κύρια ροή, γεγονός που υποδηλώνει ότι η επίτευξη εμβολικής ροής στα τμήματα αυτά είναι αδύνατο να επιτευχθεί εξαιτίας της έντονης τοπικής ανάμιξης.

Όπως προαναφέραμε, μετά την υδροδυναμική ανάλυση της δεξαμενής επαφής, το πεδίο ροής διατηρείται σταθερό και επιλύονται οι εξισώσεις μεταφοράς/απομείωσης του χλωρίου και μεταφοράς/απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Για τους όρους καταβόθρας των εξισώσεων αυτών χρησιμοποιήθηκε αρχικά μια κινητική πρώτης τάξης για την απομείωση του χλωρίου και το μοντέλο των Chick-Watson για την περίπτωση της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, που αποτελούν τις απλούστερες δυνατές εκφράσεις όπως εκτενώς αναλύθηκε στο Κεφάλαιο 5. Για την σταθερά του ρυθμού απομείωσης του

χλωρίου και για τις σταθερές του μοντέλου Chick –Watson ελήφθησαν δεδομένα από τη βιβλιογραφία.

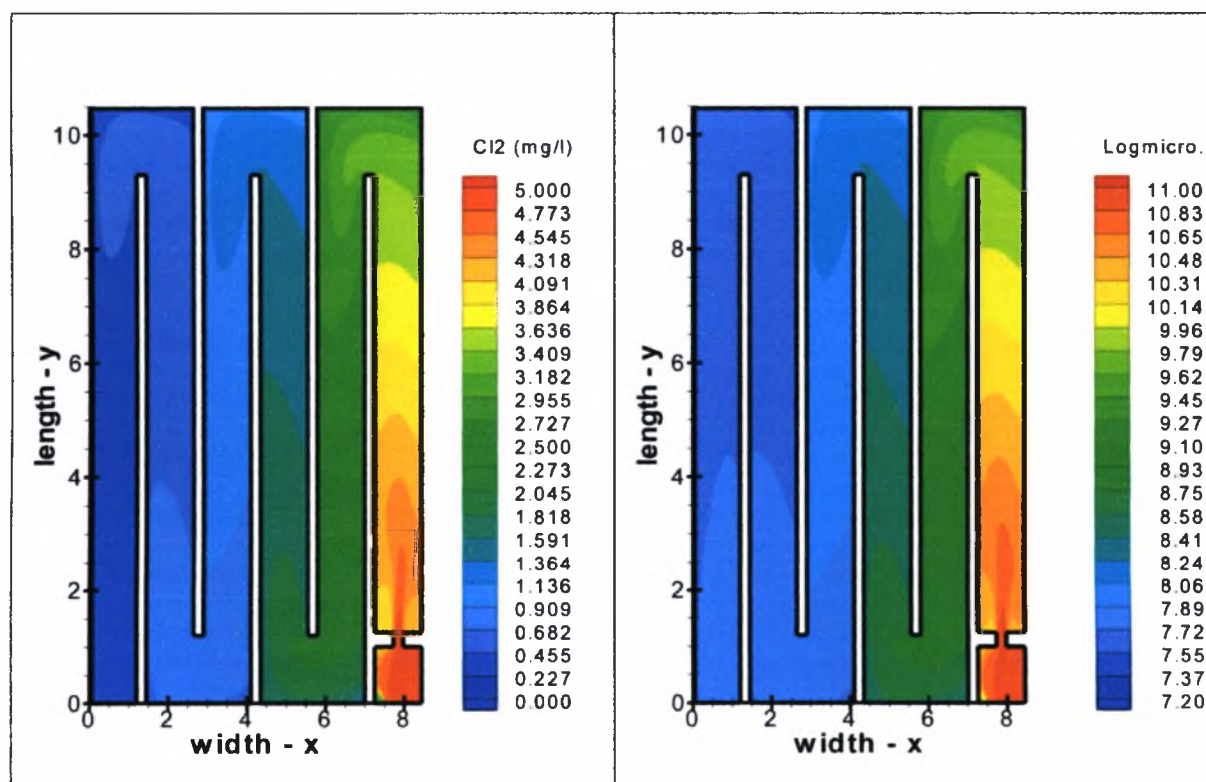


Σχήμα 8.11: Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωρίου (αριστερά) και των μικροοργανισμών (δεξιά) για $k_{Cl_2} = 2,93 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (Haas et al., 1996) και $k_n = 3,478$, $n = 1,1$ (Hassen et al., 2000).

Στο Σχήμα 8.11 παρουσιάζεται η κατανομή των συγκεντρώσεων του απολυμαντικού μέσου και των μικροοργανισμών. Ως σταθερά του ρυθμού απομείωσης του χλωρίου ελήφθη η τιμή $k_{Cl_2} = 2,93 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ δίνοντας μια ικανοποιητική συγκέντρωση υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο ($\sim 0,3 \text{ mg/l}$) που είναι σύμφωνη με το θεωρητικά αναμενόμενο ποσό χλωρίου στην έξοδο (~ 0.3 έως 0.6 mg/l) βάση του αρχικού σχεδιασμού της μονάδας. Οι σταθερές k_n και n του μοντέλου των Chick–Watson ελήφθησαν 3,478 και 1,1 αντίστοιχα. Αυτό οδήγησε σε μια 1,5 log-μείωση ή ισοδύναμα σε μια συγκέντρωση 542.280 μικροοργαν./100 ml στην έξοδο της δεξαμενής, το οποίο υπερβαίνει κατά πολύ το αρχικώς τιθέμενο όριο των 500 μικροοργαν. / 100 ml, που αποτέλεσε τη βάση των υπολογισμών κατά τον σχεδιασμό της δεξαμενής. Η απόκλιση αυτή μπορεί να πηγάζει από πολλές και διαφορετικές αιτίες, όπως η αδυναμία του μοντέλου των Chick–Watson να περιγράψει τα μη γραμμικά δεδομένα των καμπυλών επιβίωσης ως προς το χρόνο (φαινόμενο αρκετά σύνηθες στην απολύμανση αστικών λυμάτων), στην επιλογή ενός τυχαίου ζεύγους τιμών για τα k_n και n από

βιβλιογραφικές πηγές που ενδεχομένως να αναφέρεται σε διαφορετικές συνθήκες (είδος απολυμαντικού, είδος νερού προς επεξεργασία, θερμοκρασία, pH κ.ο.κ.) και τέλος στην αδυναμία της διδιάστατης ανάλυσης να λάβει υπόψη τα έντονα τρισδιάστατα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κυρίως στις περιοχές της εισόδου, του πρώτου και του δευτέρου διαμερίσματος και της περιοχής της εξόδου.

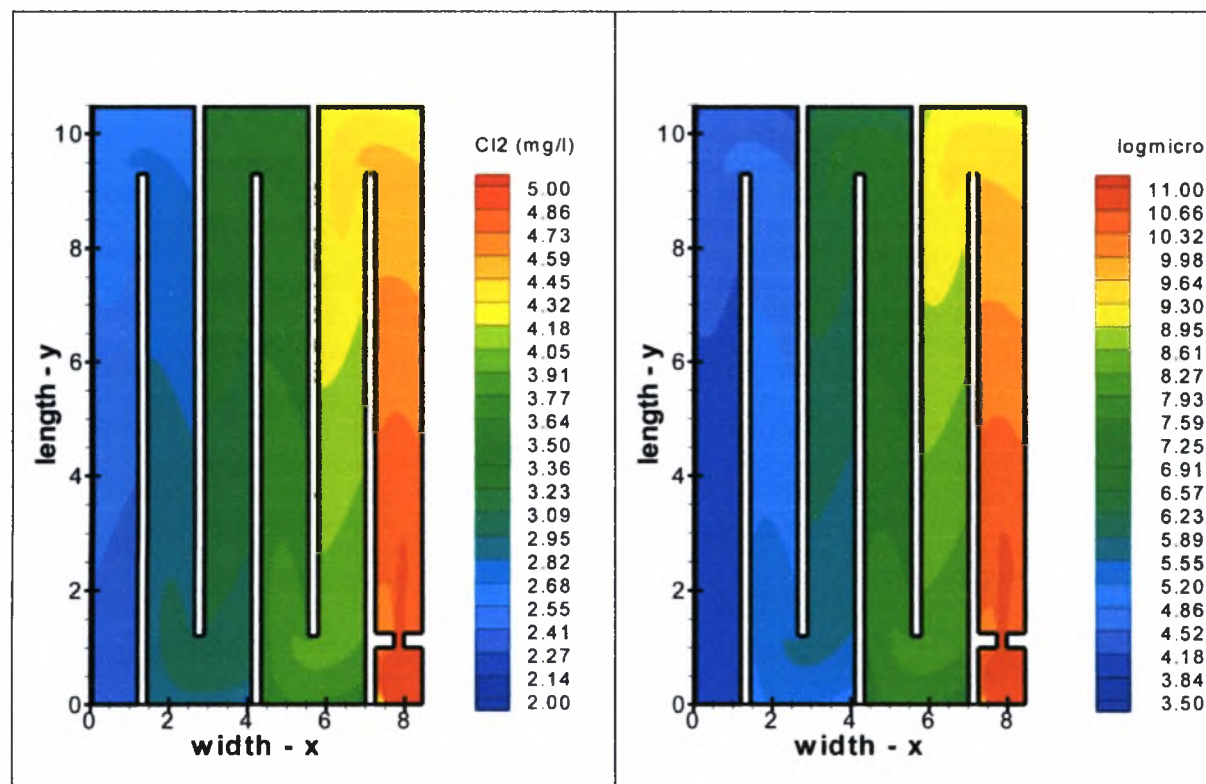
Στα Σχήματα 8.12 και 8.13 παρουσιάζεται επίσης η κατανομή των συγκεντρώσεων του απολυμαντικού μέσου και των μικροοργανισμών για διαφορετικούς ρυθμούς. Αρχικά διατηρήθηκε σταθερός ο ρυθμός απομείωσης του χλωρίου ($k_{Cl_2} = 2,93 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$), ενώ ελήφθη ένα διαφορετικό ζεύγος τιμών για τους συντελεστές του μοντέλου Chick-Watson ($k_n = 6,94$ και $n = 1,04$). Το ζεύγος αυτό τιμών έδωσε μια πολύ υψηλότερη απενεργοποίηση μικροοργανισμών, 3,2 log-μείωση ή ισοδύναμα μια συγκέντρωση ~ 4.000 μικροοργαν./100 ml στην έξοδο της δεξαμενής, η οποία όμως και πάλι δεν είναι σύμφωνη με την αναμενόμενη ποιότητα εκροής βάση του θεωρητικού σχεδιασμού της δεξαμενής χλωρίωσης.



Σχήμα 8.12: Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωρίου (αριστερά) και των μικροοργανισμών (δεξιά) για $k_{Cl_2} = 2,93 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (Haas et al., 1996) και $k_n = 6,94$, $n = 1,04$ (Haas & Karra, 1984).

Κατόπιν, ελήφθη μια πολύ πιο αργή κινητική απομείωσης του απολυμαντικού μέσου ($k_{Cl_2} = 8 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$), διατηρώντας τις ίδιες τιμές ($k_n = 6,94$, $n = 1,04$) για τις παραμέτρους του

μοντέλου Chick–Watson. Προέκυψε μια σχετικά υψηλή συγκέντρωση υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο (~ 2,2 mg/l) και μια εξαιρετικά μικρή συγκέντρωση μικροοργανισμών (~ 1 μικροοργαν./100 ml ή ισοδύναμα 7,0 log-μείωση).



Σχήμα 8.13: Κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωρίου (αριστερά) και των μικροοργανισμών (δεξιά) για $k_{Cl_2} = 8 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ (Haas *et al.*, 1996) και $k_n = 6,94$, $n = 1,04$ (Haas & Karra, 1984).

Από την παρατήρηση των Σχημάτων 8.12 και 8.13 μπορεί κανείς να διαπιστώσει πως η μεταβολή της τιμής της σταθεράς του ρυθμού απομείωσης του χλωρίου, διατηρώντας παράλληλα σταθερές τις παραμέτρους του κινητικού μοντέλου που περιγράφει την απενεργοποίηση των μικροοργανισμών, επηρεάζει έντονα το βαθμό απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Έτσι, για παράδειγμα για ένα σχετικά υψηλό ρυθμό απομείωσης του χλωρίου $k_{Cl_2} = 2,93 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, επιτυγχάνεται μια μόλις 3,2 log-μείωση των μικροοργανισμών, ενώ για βραδύτερους ρυθμούς απομείωσης του απολυμαντικού μέσου $k_{Cl_2} = 8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, η απενεργοποίηση των μικροοργανισμών είναι πολύ πιο έντονη (7,0 log-μείωση).

Συνοψίζοντας τα παραπάνω, είναι αρχικά εμφανής η ορθότητα του μαθηματικού μοντέλου ως προς την απόδοση των ανακυκλοφοριών αλλά και ως προς την περιγραφή της διεργασίας της απολύμανσης (κατανάλωση χλωρίου και καταστροφή των μικροοργανισμών), όπως προέκυψε από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων με ανάλογες διαθέσιμες εργασίες.

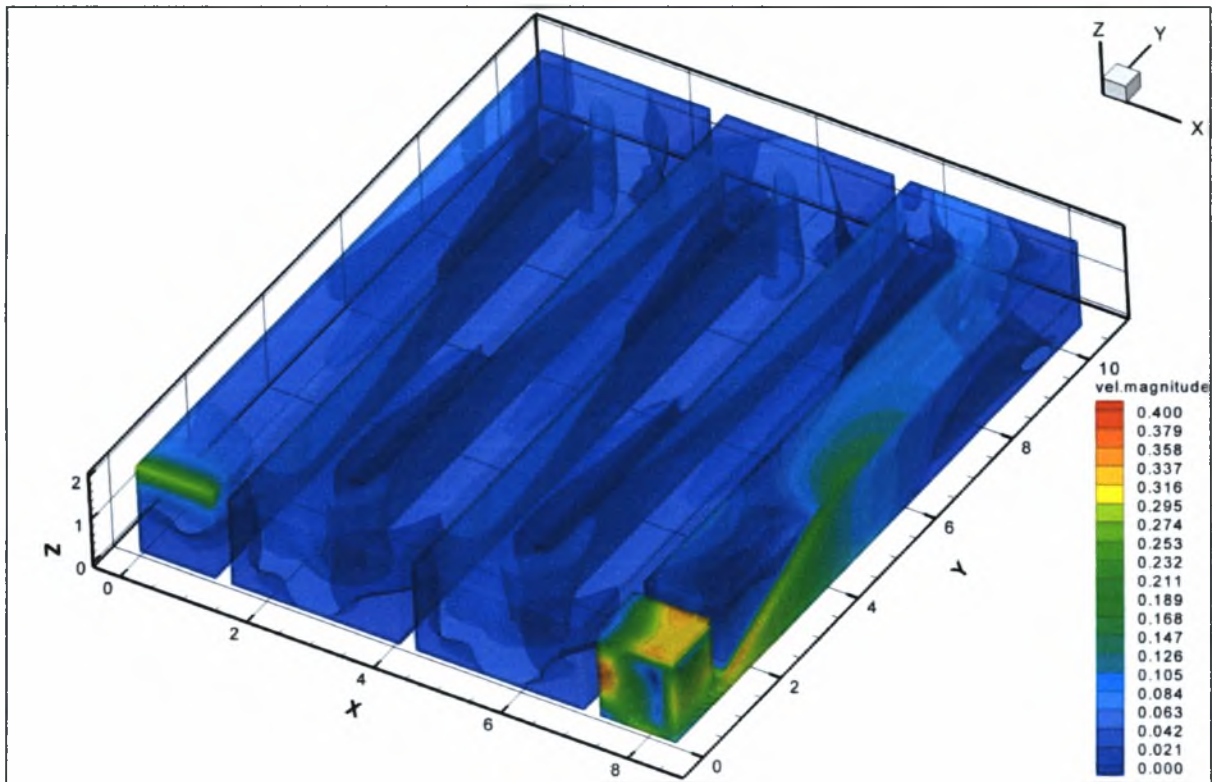
Επιπλέον, γίνεται σαφές πως η χρήση διαφορετικών τιμών για τις σταθερές των κινητικών μοντέλων απομείωσης του χλωρίου και απενεργοποίησης των μικροοργανισμών επηρεάζει σημαντικά το παραγόμενο προφίλ των συγκεντρώσεων αλλά και την εκτιμώμενη ποιότητα της εκροής.

Για την υπερπήδηση των εμποδίων, που έγιναν εμφανή κατά τη διδιάστατη ανάλυση της δεξαμενής επαφής, είναι αναγκαία η ανάπτυξη ενός τρισδιάστατου (3-D) αριθμητικού μοντέλου, για την βελτίωση της ικανότητας πρόβλεψης της ροής. Επιπρόσθετα, κρίνεται σκόπιμη η μελέτη αρκετών συνδυασμών των κινητικών περιγραφής της απομείωσης του χλωρίου και των κινητικών περιγραφής της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, που αναπτύχθηκαν αναλυτικά στο Κεφάλαιο 5, για διάφορες τιμές των σταθερών των μοντέλων.

8.5.2. Εφαρμογή του μοντέλου σε τρεις διαστάσεις (Υδροδυναμική ανάλυση)

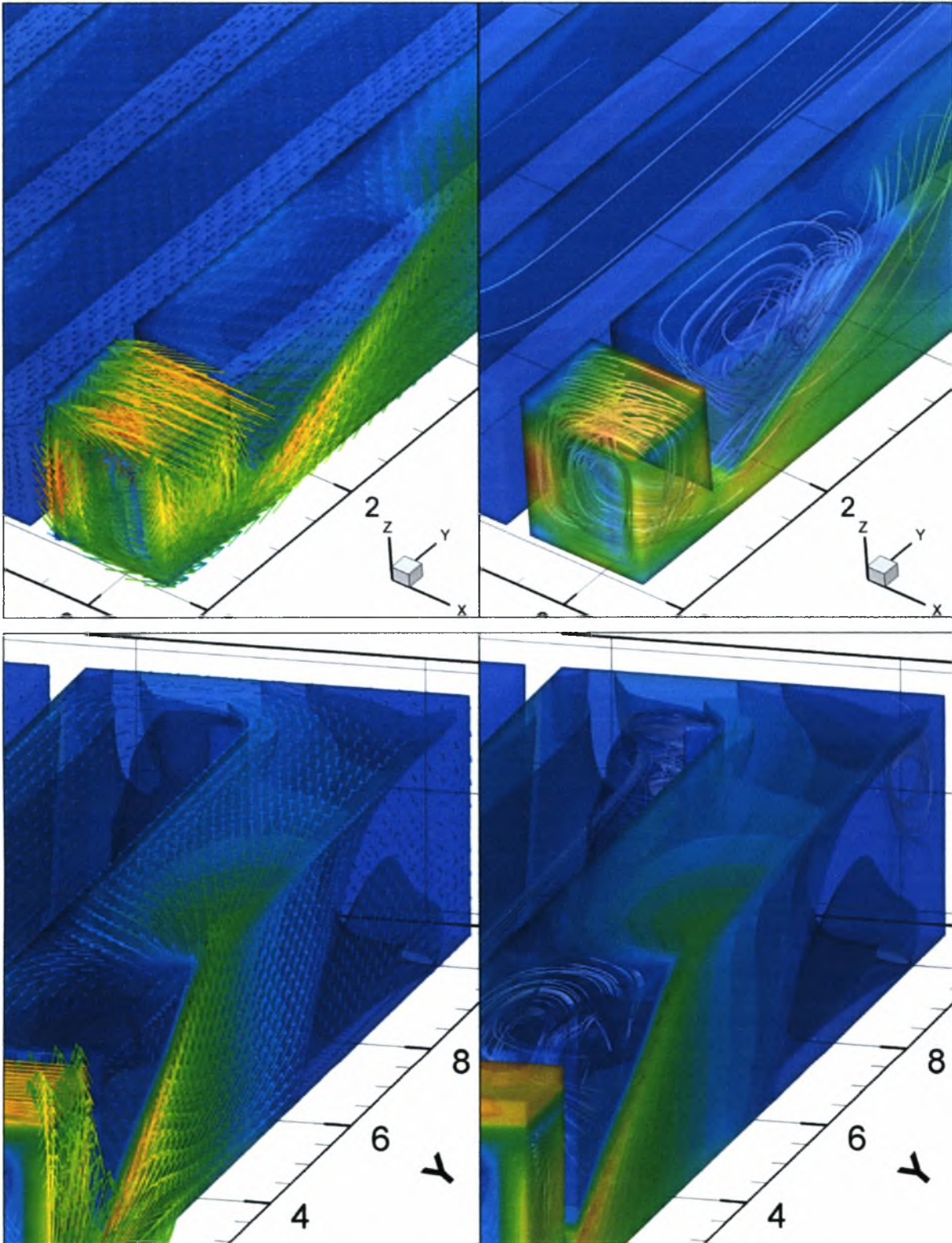
Η ροή σε μια δεξαμενή επαφής είναι έντονα τριών διαστάσεων κυρίως στις περιοχές της εισόδου, του πρώτου και του δεύτερου διαμερίσματος και στην περιοχή της εξόδου. Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώθηκε από πολλούς ερευνητές, οι οποίοι διαπίστωσαν μεταξύ άλλων μια έντονη ανακολουθία μεταξύ μετρούμενων και υπολογιζόμενων τιμών στα προαναφερόμενα σημεία, με βάση τη διδιάστατη ανάλυση. Για το λόγο αυτό αλλά και για την ορθότερη και πιο ρεαλιστική απόδοση της πραγματικής κατάστασης αναπτύχθηκε όπως προαναφέραμε ένα τρισδιάστατο μοντέλο.

Στο Σχήμα 8.14 απεικονίζεται το συνολικά παραγόμενο προφίλ της ροής (κατανομή ταχυτήτων σε ισοεπιφάνειες / iso-surfaces) όπου είναι εμφανή τα σημεία ανακυκλοφορίας της ροής (σημεία μηδενισμού της ταχύτητας). Επιπλέον, διαπιστώνονται τα ισχυρά 3D φαινόμενα κυρίως στο θάλαμο αρχικής ανάμιξης και στο πρώτο διαμέρισμα της δεξαμενής χλωρίωσης επιβεβαιώνοντας έτσι την περιορισμένη ικανότητα του διδιάστατου μοντέλου να προσομοιώσει ικανοποιητικά τη ροή στα σημεία αυτά.



Σχήμα 8.14: Κατανομή του μέτρου των ταχυτήτων

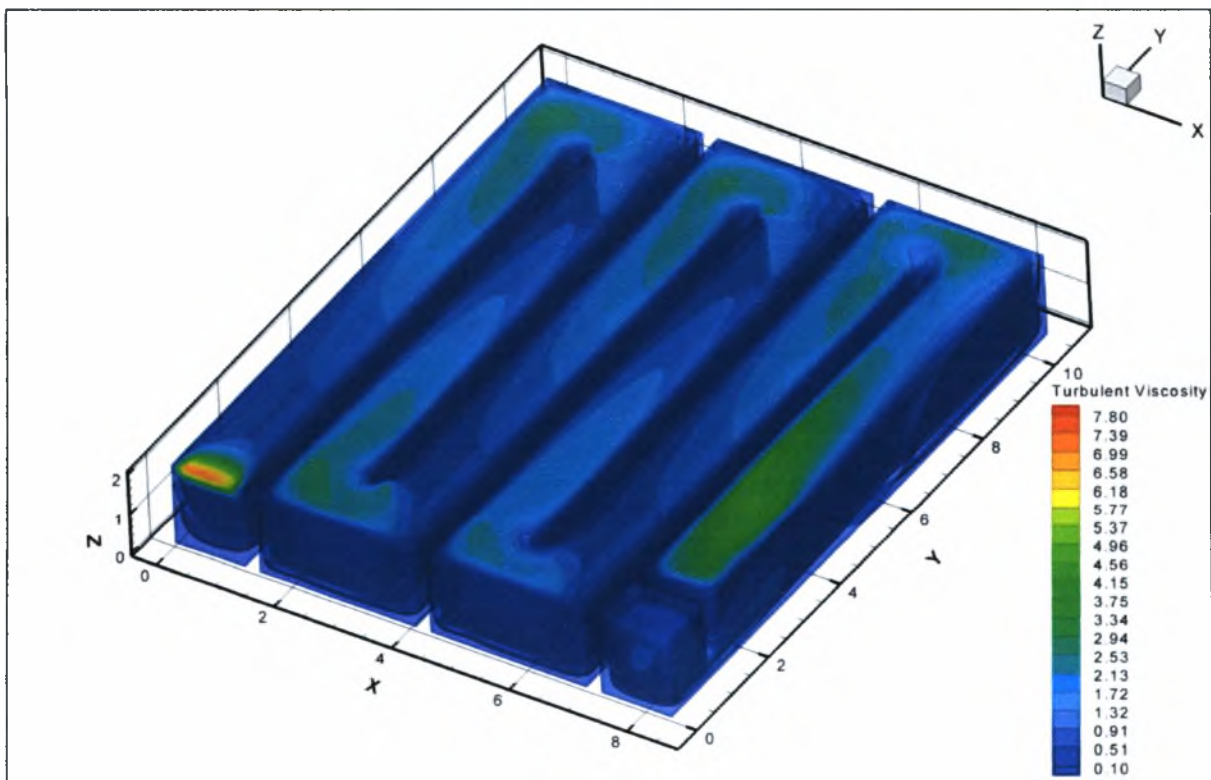
Στο θάλαμο αρχικής ανάμιξης παρατηρείται μια έντονη διακύμανση του μέτρου της ταχύτητας και ισχυρή ανακυκλοφορία του ρευστού. Πιο αναλυτικά, οι μέγιστες τιμές της ταχύτητας συναντώνται στην είσοδο στο χώρο του θαλάμου αρχικής ανάμιξης, στην στένωση που δημιουργείται από το τοίχιο υποχείλισης ακριβώς πριν την είσοδο του ρευστού στο κυρίως τμήμα της δεξαμενής και τέλος στο πρώτο μισό του πρώτου διαμερίσματος της δεξαμενής επαφής με διεύθυνση από τα κατώτερα προς ανώτερα στρώματα του ρευστού. Μετά την είσοδο στο κυρίως τμήμα της δεξαμενής παρατηρείται μια εκτεταμένη ανακυκλοφορία (νεκρή ζώνη), αμέσως μετά το τοίχιο υποχείλισης, η οποία εκτείνεται για αρκετά μέτρα (κατά μήκος του πρώτου διαμερίσματος) και σχεδόν σε όλο το ύψος του ρευστού. Η λεπτομερής απεικόνιση των παρατηρήσεων αυτών δίνεται στο Σχήμα 8.15.



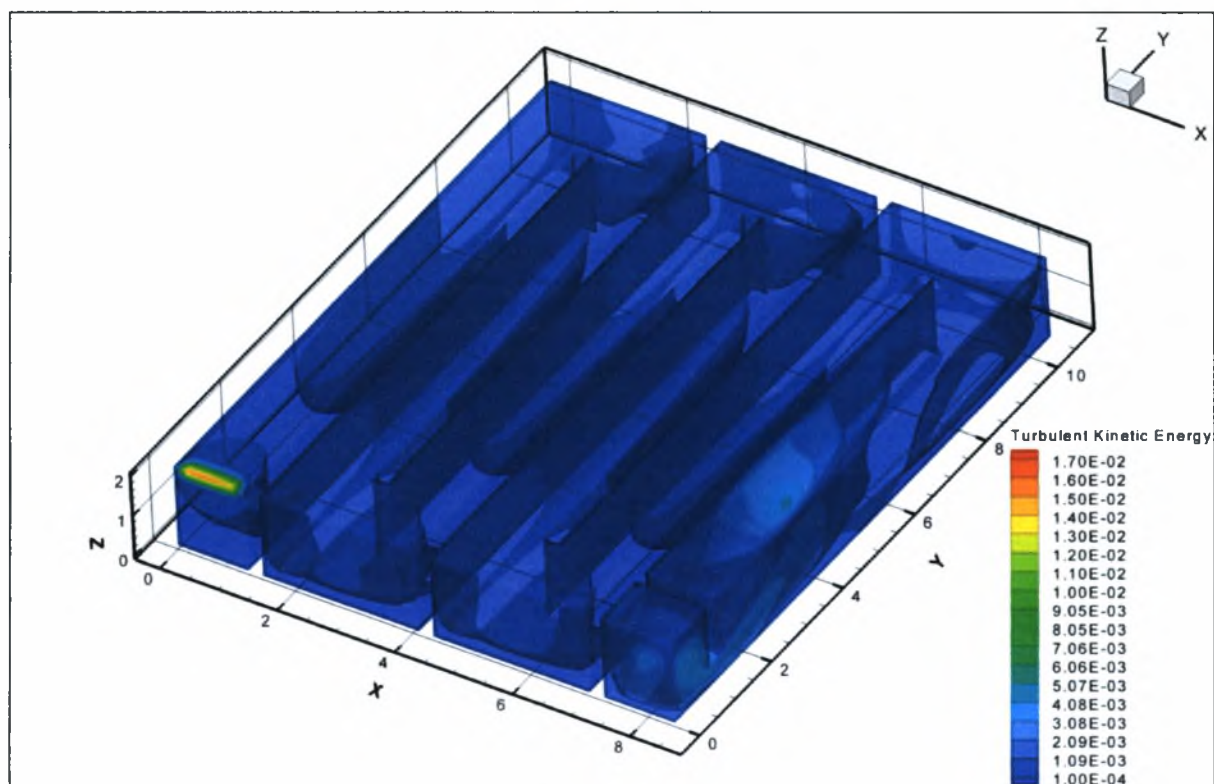
Σχήμα 8.15: Κατανομή του μέτρου των ταχυτήτων και τρισδιάστατες ροϊκές γραμμές (λεπτομέρεια του θαλάμου αρχικής ανάμιξης, του πρώτου διαμερίσματος και της εκτροπής της ροής από το πρώτο στο δεύτερο διαμέρισμα)

Ο 3Δ χαρακτήρας της ροής παραμένει ισχυρός σχεδόν σε όλο το μήκος του πρώτου διαμερίσματος. Επιπρόσθετα, οι παραγόμενες ανακυκλοφορίες, τόσο στα σημεία αναστροφής της ροής όσο και στις ορθές γωνίες της δεξαμενής, εκτείνονται σε όλο σχεδόν το βάθος του υγρού (κατακόρυφες ανακυκλοφορίες στο Σχήμα 8.15), ενισχύοντας έτσι την απαίτηση για παραγωγή ενός τρισδιάστατου μοντέλου για την ορθή απόδοση των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών της δεξαμενής επαφής. Η έντονη αλληλεπίδραση της αντίστροφης ροής με την κύρια ροή, υποδηλώνει επίσης ότι η προσέγγιση της ιδανικής εμβολικής ροής είναι αδύνατο να επιτευχθεί, για την εν λόγω γεωμετρία που μελετάται, εξαιτίας της έντονης τοπικής ανάμιξης στα σημεία αναστροφής της ροής.

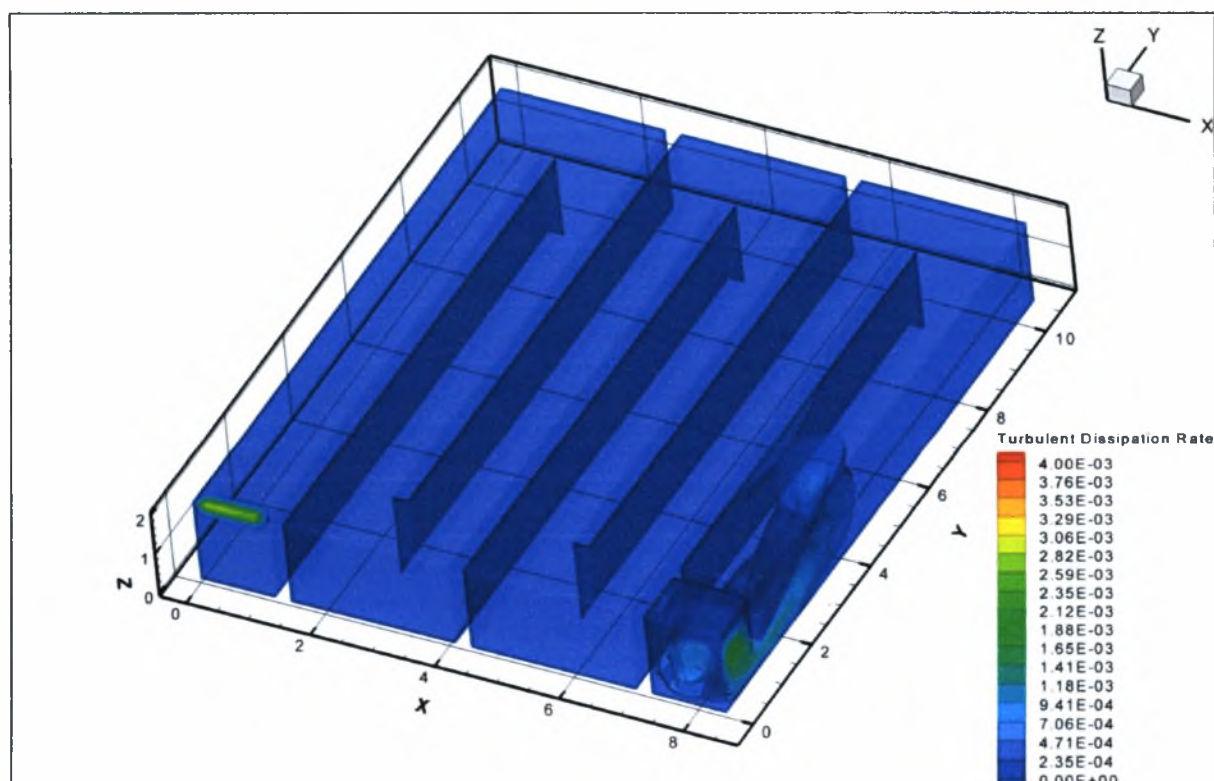
Ο μεγαλύτερος βαθμός τύρβης παρουσιάστηκε στην περιοχή μεταξύ του υπερχειλιστή εισόδου και του θαλάμου εισροής-ανάμιξης, κυρίως εξαιτίας των έντονων ανακυκλοφοριών που παρουσιάζει η ροή στην περιοχή αυτή. Το επίπεδο της τύρβης εξακολουθεί να είναι σημαντικό στο πάνω τμήμα της ροής του διαμερίσματος 1, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στα Σχήματα 8.16 έως 8.18.



Σχήμα 8.16: Κατανομή του μέτρου του τυρβώδους ιξώδους



Σχήμα 8.17: Κινητική ενέργεια τύρβης, k



Σχήμα 8.18: Ρυθμός σκέδασης τύρβης, ϵ

Οι περιοχές του διαμερίσματος 2 για τις οποίες διαγνώστηκαν τα μεγαλύτερα επίπεδα τύρβης, περιορίστηκαν στο πρώτο μισό του μήκους του διαμερίσματος αυτού. Τα υψηλά αυτά επίπεδα τύρβης αντιστοιχούν στις οριζόντιες ανακυκλοφορίες της ροής στα υψηλότερα και στα μεσαία στρώματα της ροής καθώς και στην περιοχή του πυθμένα αμέσως μετά από το εσωτερικό διαχωριστικό τοίχιο του διαμερίσματος 1 (στο πίσω μέρος του διαχωριστικού τοιχίου προς την διεύθυνση της ροής). Η τύρβη από το διαμέρισμα 2 και μετά τείνει να διατηρείται εξαιτίας δύο άλλων μηχανισμών παραγωγής της, που είναι η επιτάχυνση-επιβράδυνση στις γειτονικές περιοχές μεταξύ των διαμερισμάτων και οι ανακυκλοφορίες της ροής στα σημεία πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία.

8.5.3. Εφαρμογή του μοντέλου σε τρεις διαστάσεις (Έλεγχος κινητικών μοντέλων)

Από την προσεχτική έρευνα της βιβλιογραφίας και όπως ενδελεχώς αναλύθηκε στην παράγραφο 5.6, διαπιστώθηκε πως έχουν προταθεί πλήθος μαθηματικών μοντέλων, για την περιγραφή της κινητικής της απολυμαντικής δράσεως (κινητική απενεργοποίησης των μικροοργανισμών). Τα περισσότερα από αυτά τα μοντέλα είναι ιδιαίτερα σύνθετα, για να έχουν πρακτική εφαρμογή. Γενικά, τα μοντέλα που προτιμώνται είναι συνήθως το απλό μοντέλο των Chick–Watson (γραμμικό λογαριθμικό μοντέλο) ή το πιο χρήσιμο εμπειρικό μοντέλο του Hom (1972), το οποίο ταιριάζει στα μη γραμμικά δεδομένα της καμπύλης λογαριθμικής επιβίωσης ως προς το χρόνο t . Ειδικότερα για την απολύμανση των αστικών λυμάτων, έχει επικρατήσει το μοντέλο των Collins-Selleck, το οποίο επίσης αποδίδει με επιτυχία τη μη γραμμικότητα των καμπυλών επιβίωσης (ώμος-shoulder και ουρά-tail καμπυλών) και έχει γενικώς προκύψει από την πρακτική εφαρμογή στην απολύμανση δευτεροβάθμιων εκροών από εγκαταστάσεις επεξεργασίας αστικών λυμάτων.

Οι σταθερές των διαφόρων μοντέλων προσδιορίζονται πειραματικά στο εργαστήριο ή σε εν λειτουργία εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων με τη μέτρηση σε ένα συγκεκριμένο απόβλητο του αρχικού αριθμού των μικροοργανισμών N_0 και του αριθμού τους N_t που μένει μετά από χρόνο επαφής t , καθώς και της συγκέντρωσης C του απολυμαντικού μέσου που χρησιμοποιήθηκε. Έτσι, από την γραφική παράσταση μεταξύ των $\ln(N_t/N_0) - \ln t$, επιτρέπεται ο γραφικός προσδιορισμός των σταθερών του κάθε μοντέλου.

Ολοκληρώνοντας λοιπόν την σύνοψη του Κεφαλαίου 5.6, γίνεται σαφές πως ο προσδιορισμός της κινητικής της αδρανοποίησης των μικροοργανισμών είναι γενικά εμπειρικός και βασίζεται σε εργαστηριακές μελέτες για ένα συγκεκριμένο είδος αποβλήτου.

Συνεπώς, αφενός η εγκυρότητα του καθενός από τα μοντέλα περιορίζεται σε συνθήκες όμοιες με εκείνες που ελήφθησαν κατά την εξαγωγή του (αντιδραστήρες διαλείπουσας λειτουργίας ή συνεχούς ροής κ.ο.κ.) και αφετέρου οι παράμετροι (σταθερές) των κινητικών μοντέλων, που προκύπτουν γραφικά, εξαρτώνται από πλήθος παραγόντων όπως το είδος των βακτηρίων που μελετώνται, τη μορφή του χλωρίου που χρησιμοποιείται, τη θερμοκρασία, το pH και τη χημική σύσταση του προς επεξεργασία αποβλήτου κ.ο.κ.

Λόγω της προαναφερόμενης ποικιλίας των μαθηματικών εκφράσεων και ειδικότερα εξαιτίας της πληθώρας των τιμών για τις σταθερές των κινητικών μοντέλων καθώς και λόγω της έλλειψης πειραματικών μετρήσεων που θα επέτρεπαν το γραφικό υπολογισμό αυτών των σταθερών, στον Πίνακα 8.2 συγκεντρώνονται οι τιμές των σταθερών για ορισμένα επιλεγμένα μοντέλα όπως συναντώνται στην βιβλιογραφία.

Πίνακας 8.2: Τιμές σταθερών επιλεγμένων κινητικών μοντέλων περιγραφής της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών

MONTELO CHICK - WATSON						
Οργανισμός	pH	T (°C)	k (l ⁿ mg ⁻ⁿ min ⁻¹)	n	Συγγραφέας	Πηγή
Απενεργοποίηση με ελεύθερο χλώριο						
<i>E.Coli</i>	8.5	2-5	10.9	1.2	Butterfield et al.,1943	Haas & Karra, 1984a
	9.8	2-5	1.18	1.29		
	10.7	2-5	0.279	1.11		
	8.5	20-25	30.6	1.46		
	9.8	20-25	5.91	1.34		
	10.7	20-25	1.30	0.79		
<i>Aerobacter aerogenes</i>	7	20-25	1.39*10 ⁴	3.78		
<i>E.Coli</i>	7	25	4.02	0.801		
Απενεργοποίηση με ενωμένο χλώριο						
<i>E.Coli</i>	7	5	0.656	1.16	Severin, 1975	Haas & Karra, 1984a
	7	20	1.01	0		
<i>Aerobacter aerogenes</i>	6.5	20	0.363	1.19	Butterfield & Wattie, 1946	Haas & Karra , 1984a
	7	20	0.241	1.35		
	7.8	20	0.095	1.18		
	8.5	20	0.0715	0.917		
	9.5	20	0.0358	1.16		
	10.5	20	0.00809	1.7		
	<i>E.Coli</i>	7	3-5	0.084		
8.5		3-5	0.0109	1.52		
9.5		3-5	2.84*10-5	13.3		
6.5		20-25	0.483	1.07		
7.0		20-25	0.316	1.04		
7.8		20-25	0.193	1.18		
8.5		20-25	0.0854	1.125		
9.5		20-25	0.049	1.37		
10.5	20-25	0.0125	2.27			

MONTEAO COLLINS - SELLECK						
Σύστημα	pH	T (°C)	b (lmg ^{-l} min ^{-l})	n	Cl ₂ (mg/l)	Πηγή
Palo Alto-1978	-	-	0.193	3.15	-	Haas & Karra, 1984b
Palo Alto-(unfiltered)	-	-	0.452	2.22	-	
Palo Alto-(lab filtered)	-	-	1.190	2.10	-	
San Ramon Lab	-	-	1.54	1.62	-	
San Ramon Field	-	-	0.598	1.79	-	
San Jofe – non nitrified	-	-	0.246	2.82	-	
Μελέτη σε αντιδραστήρες διαλείπουσας λειτουργίας (batch chlorination)						
Πρωτοβάθμια επεξεργασμένα	7.2	14-16	0.345	2.76	3.1-7.6	Selleck et al., 1978
Πρωτοβάθμια επεξεργασμένα	7.2	14-15	0.454	2.90	3.1-6.3	
Ενεργό ύδ	-	20-25	0.4	2.82	-	
Ενεργό ύδ	-	20-25	0.196	2.67	-	
Μελέτη σε πραγματική δεξαμενή χλωρίωσης						
Ροή σε αγωγό			0.588	2.35		Selleck et al., 1978
Ανοιχτό κανάλι			0.244	2.51		

MONTELO HOM					
Οργανισμός	Μορφή Cl ₂	k _H (mgCl/l) ⁻ⁿ sec ^{-m}	m	n	Πηγή
<i>E.Coli</i>	ελεύθερο	5.26	0.18	0.23	Greene, 2002
	ενωμένο	2.96	0.22	0.67	
	ελεύθερο	5.00	0.064	0.41	
	ενωμένο	-	-	-	
<i>MS2</i>	ελεύθερο	0.0758	0.89	1.10	
	ενωμένο	0.110	0.19	5.10E-8	
	ελεύθερο	0.120	0.81	0.84	
	ενωμένο	1.72E-04	0.88	1.80	
<i>Giardia</i>	ελεύθερο	8.04E-04	1.20	0.96	
	ενωμένο	5.38E-10	2.50	1.70	
	ελεύθερο	7.20E-04	1.20	0.95	
	ενωμένο	3.01E-10	2.50	0.95	

Από την προσεκτική ανάλυση των τιμών του Πίνακα 8.2, διαπιστώνεται πως ο κάθε τύπος μικροοργανισμού εμφανίζει μια δική του ξεχωριστή ταχύτητα απενεργοποίησης, η οποία μάλιστα δεν είναι μοναδική καθώς παρουσιάζει έντονη διακύμανση ως αποτέλεσμα της μεταβολής της θερμοκρασίας ή/και του pH. Επιπρόσθετα, διαπιστώνεται πως η χρήση διαφορετικών μορφών χλωρίου (ελεύθερου ή ενωμένου), για σταθερές συνθήκες θερμοκρασίας και pH, μεταβάλλει σημαντικά τις σταθερές των κινητικών μοντέλων περιγραφής της απενεργοποίησης.

Ανάλογα είναι τα αποτελέσματα από την εξέταση των κινητικών απομείωσης του απολυμαντικού μέσου. Πιο αναλυτικά, μελέτες που έχουν διεξαχθεί πάνω στην κατανόηση της κινητικής της απομείωσης του χλωρίου, στα συστήματα τροφοδότησης πόσιμου νερού

ή/και επεξεργασίας λυμάτων, έχουν εξάγει αρκετά μοντέλα, όπως εκτενώς αναλύθηκε στην παράγραφο 5.7. Τα κλασικά μοντέλα, που συναντώνται στη βιβλιογραφία, για την περιγραφή των αντιδράσεων του χλωρίου, είναι πρώτης τάξης αναφορικά με τη συγκέντρωση του χλωρίου. Με άλλα λόγια η συγκέντρωση του χλωρίου απομειώνεται εκθετικά ως προς το χρόνο. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια παρουσιάζει το μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης, το οποίο υποθέτει δύο συστατικά στην αντίδραση, καθένα από τα οποία απομειώνεται ακολουθώντας μια κινητική πρώτης τάξης. Το μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης δίνει την καλύτερη ταύτιση με τα πειραματικά αποτελέσματα, όπως αποδείχθηκε από πολλούς ερευνητές.

Στον Πίνακα 8.3 συγκεντρώνονται ορισμένες βιβλιογραφικές τιμές για τις σταθερές των προαναφερόμενων μοντέλων περιγραφής της απομείωσης του χλωρίου, σε συστήματα απολύμανσης νερού και λυμάτων.

Πίνακας 8.3: Βιβλιογραφικές τιμές των σταθερών επιλεγμένων κινητικών μοντέλων περιγραφής της απομείωσης του χλωρίου

ΠΡΩΤΗΣ ΤΑΞΗΣ - SIMPLE FIRST ORDER			
<i>Για πειράματα σε αντιδραστήρες διαλείπουσας λειτουργίας</i>			
Μορφή Cl₂	Είδος νερού	K_{Cl₂} (1/min)	Πηγή
Ελεύθερο	άνευ “άμεσης ζήτησης”	0.008	Haas et al., 1996
	ταμιευτήρα	0.033	
	ποτάμι	0.048	
	υπόγεια ύδατα	0.176	
Ενωμένο	άνευ άμεσης ζήτησης	0.00036	
	ταμιευτήρα	0.001	
	ποτάμι	0.0015	

ΠΑΡΑΛΛΗΛΗΣ ΠΡΩΤΗΣ ΤΑΞΗΣ - PARALLEL FIRST ORDER				
<i>Για δευτεροβάθμια επεξεργασμένα αστικά λύματα</i>				
Μορφή Cl₂	K_{Cl₂,rapid} (1/min)	K_{Cl₂,slow} (1/min)	X_{rapid}	Πηγή
Υποχλωριώδες νάτριο	0.818	0.00164	0.115	Haas & Karra, 1984c
	0.751	0.0129	0.588	
	0.742	0.00511	0.645	
	1.06	0.00176	0.206	
	1.25	0.00229	0.220	
	1.25	0.0017	0.185	
	1.10	0.00156	0.211	
	1.16	0.00118	0.176	
	0.952	0.00188	0.157	
	0.794	0.00175	0.157	

Αφενός η μορφή του απολυμαντικού μέσου και αφετέρου το είδος του νερού ή του αποβλήτου που οδηγείται προς απολύμανση, επηρεάζουν έντονα τις σταθερές των μοντέλων. Η εξίσωση μεταφοράς-απομείωσης του χλωρίου και η εξίσωση μεταφοράς -απενεργοποίησης

των μικροοργανισμών, μοντελοποιούνται όπως είδαμε στο Κεφάλαιο 5 με δύο ξεχωριστές εξισώσεις συναγωγής – διασποράς. Αμφότερες, οι εξισώσεις μεταφοράς του χλωρίου και των μικροοργανισμών, περιλαμβάνουν ένα όρο καταβόθρας που αναπαριστά την κινητική απομείωσης του χλωρίου και την κινητική απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, αντίστοιχα. Οι ποικιλία των μοντέλων που έχουν αναπτυχθεί για την περιγραφή των κινητικών αυτών αλλά και η έντονη εξάρτηση των σταθερών των κινητικών μοντέλων από ποικίλους παράγοντες, όπως παρουσιάστηκε στους πιο πάνω πίνακες, δημιουργούν ένα εμπόδιο στην επιτυχή προσομοίωση της χημείας της χλωρίωσης.

Για τους παραπάνω λόγους, στην παράγραφο αυτή παρουσιάζεται η υπολογιζόμενη ποιότητα εκροής αναφορικά με το υπολειμματικό χλώριο και τη συγκέντρωση των μικροοργανισμών κατά την χρήση διαφόρων συνδυασμών κινητικών μοντέλων και διαφορετικών τιμών για τις σταθερές των μοντέλων αυτών.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων (εκτίμηση ποιότητας εκροής) συγκρίνονται με την αναμενόμενη εκροή βάση του θεωρητικού σχεδιασμού της εν λόγω μονάδας καθώς και βάση των αποτελεσμάτων που υπάρχουν στη διάθεσή μας από το πρόγραμμα λειτουργίας ανάλογων εγκαταστάσεων στην Ελλάδα (πρόγραμμα λειτουργίας και συντήρησης ΕΕΛ Δήμου Αλμυρού και Ευρείας Περιοχής). Συγκεκριμένα, για δευτεροβάθμια επεξεργασμένα λύματα, η μέγιστη συγκέντρωση των μικροοργανισμών (ολικά κολοβακτηρίδια), στην είσοδο της δεξαμενής επαφής, λογίζεται περίπου $\sim 10^7$ TC/100 ml (ή ισοδύναμα $\sim 10^{11}$ TC/m³), με την παραδοχή ότι μια πολύ μικρή απενεργοποίηση συναίβει στις προηγούμενες υπομονάδες της ΕΕΛ. Για την επίτευξη των ορίων εκροής (<500 TC/100 ml) υπολογίστηκε, κατά το σχεδιασμό της δεξαμενής, ότι απαιτείται η συνεχής προσθήκη περίπου 5 mg/l διαλύματος NaOCl (14% κ.ο.) σε μια δεξαμενή επαφής που εξασφαλίζει ένα ελάχιστο θεωρητικό χρόνο παραμονής 30 min. Όσον αφορά τη συγκέντρωση του υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο της δεξαμενής, θεωρητικώς δεν θα πρέπει να εξαντλείται (>0.2 mg/l) και δεν είναι θεμιτό να ξεπερνά τα 0.6-1 mg/l ώστε να αποφεύγεται η άσκοπη κατανάλωση απολυμαντικού μέσου καθώς και διαλύματος αποχλωρίωσης για την επαναφορά της εκροής σε επίπεδα χλωρίου < 0.3 mg/l.

Σκοπός της χρήσης διαφόρων συνδυασμών κινητικών μοντέλων και διαφορετικών τιμών για τις σταθερές των μοντέλων αυτών είναι αφενός η ανάλυση της ευαισθησίας που παρουσιάζει το παραγόμενο προφίλ των συγκεντρώσεων του απολυμαντικού μέσου και των μικροοργανισμών στους συνδυασμούς αυτούς και αφετέρου να εξαχθεί ο καλύτερος συνδυασμός που θα μπορούσε να αποτελέσει ανεπιφύλακτα το σχεδιαστικό εργαλείο για ανάλογου τύπου προβλήματα.

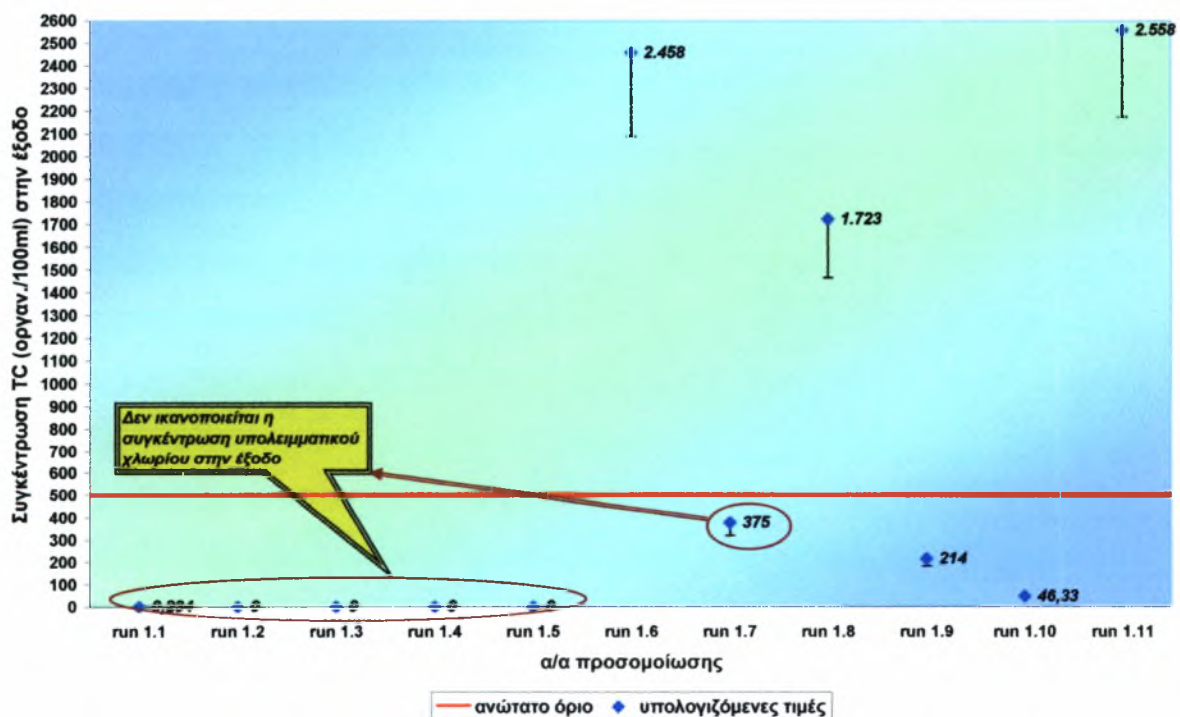
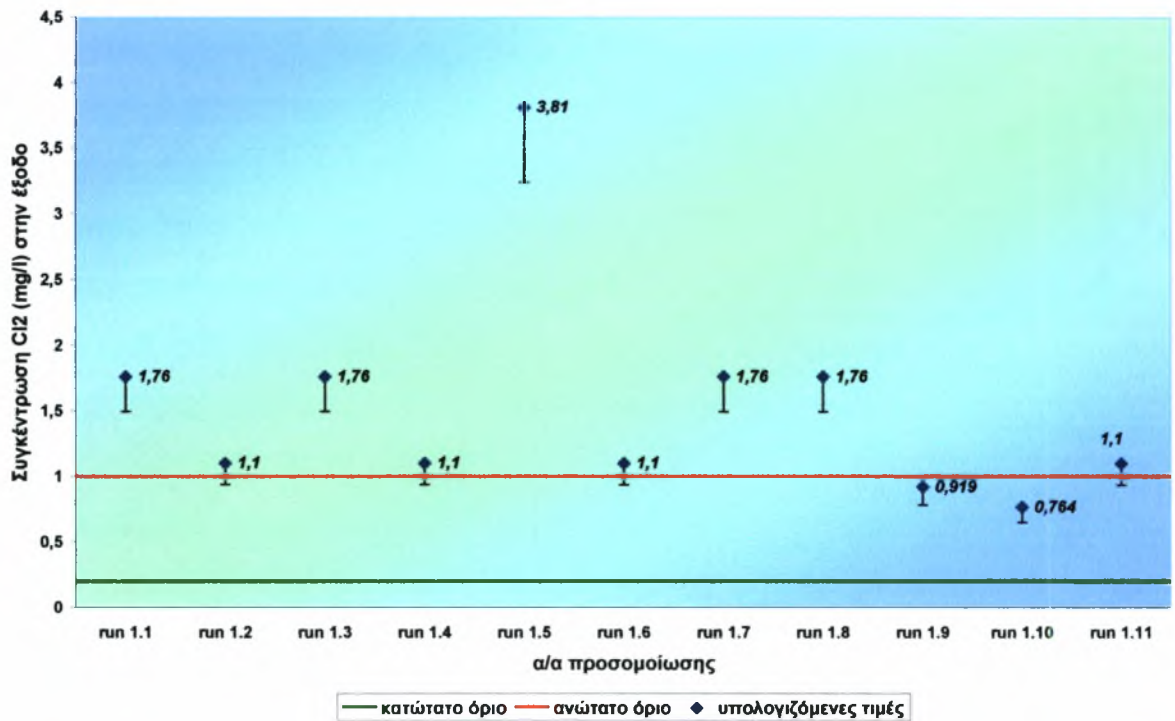
Η διαδικασία που ακολουθήθηκε ήταν η εξής: Αρχικά επιλύθηκαν οι εξισώσεις που διέπουν την τυρβώδη ροή. Μετά την υδροδυναμική ανάλυση της δεξαμενής επαφής, το πεδίο ροής διατηρείται σταθερό και επιλύονται οι εξισώσεις μεταφοράς/απομείωσης του χλωρίου και μεταφοράς/απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Για τους όρους καταβόθρας των εξισώσεων αυτών, χρησιμοποιήθηκε αρχικά μια κινητική πρώτης τάξης για την απομείωση του χλωρίου και το μοντέλο των Chick-Watson για την περίπτωση της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, που αποτελούν τις απλούστερες δυνατές εκφράσεις όπως εκτενώς αναλύθηκε στο Κεφάλαιο 5. Για την σταθερά του ρυθμού απομείωσης του χλωρίου και για τις σταθερές του μοντέλου Chick –Watson ελήφθησαν δεδομένα από τη βιβλιογραφία ορισμένα από τα οποία παρουσιάστηκαν προηγουμένως. Στον Πίνακα 8.4 παρουσιάζονται οι δοκιμές που διεξήχθησαν για το συγκεκριμένο ζεύγος μοντέλων και δίνεται η μέση τιμή της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου και των ολικών κολοβακτηρίων στην έξοδο της δεξαμενής, για τη μόνιμη κατάσταση.

Πίνακας 8.4: Ποιότητα εκροής με την απλούστερη δυνατή θεώρηση (περιγραφή απομείωσης χλωρίου με κινητική πρώτης τάξης και απενεργοποίησης μικροοργανισμών με το μοντέλο Chick-Watson).

	Cl ₂ -Simple first order	Chick-Watson		
	$C = C_0 \cdot \exp(-k \cdot t)$	$\frac{dN_t}{dt} = -k_n \cdot C^n \cdot N_t$	ΕΞΟΔΟΣ	
Run 1	Συμβολισμός ζεύγους μοντέλων : SFO-CW		Cl2 (mg/l)	micro (οργαν./100 ml)
	KCl ₂	Kn & n		
1.1	0,00055 s ⁻¹	6,276 & 1,1	1,76	0,234
1.2	0,0008 s ⁻¹	5,079 & 0,79	1,1	~ 0
1.3	0,00055 s ⁻¹	6,94 & 1,04	1,76	0,437*10 ⁻⁴
1.4	0,0008 s ⁻¹	6,94 & 1,04	1,1	44,3*10 ⁻⁴
1.5	0,00013 s ⁻¹	6,94 & 1,04	3,81	~ 0
1.6	0,0008 s ⁻¹	3,478 & 1,1	1,1	2.458
1.7	0,00055 s ⁻¹	3,478 & 1,1	1,76	375
1.8	0,00055 s ⁻¹	3,37 & 1,125	1,76	1.723
1.9	0,0009 s ⁻¹	5,0 & 1,1	0,919	214
1.10	0,001 s ⁻¹	6,276 & 1,1	0,764	46,33
1.11	0,0008 s ⁻¹	1,91 & 1,0	1,1	2.558

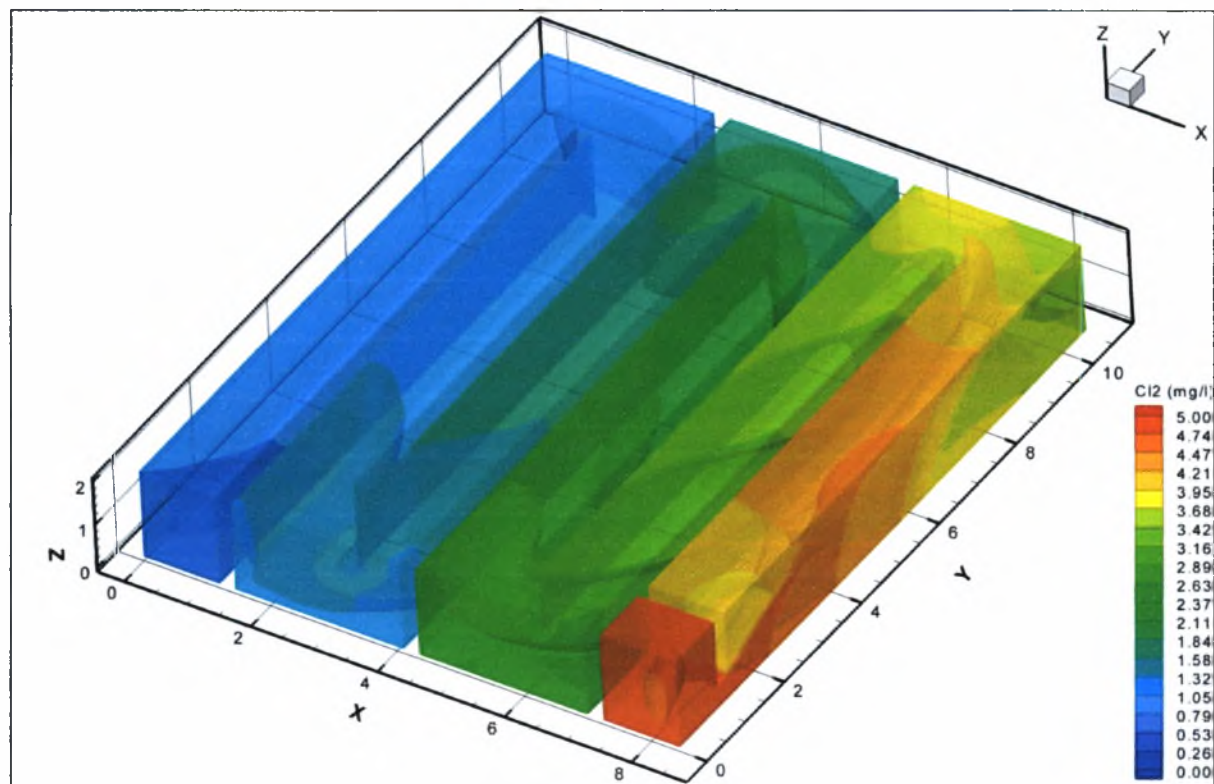
Από την προσεκτική ανάλυση των αποτελεσμάτων, διαπιστώνεται πως η χρήση του συγκεκριμένου ζεύγους μοντέλων, για διάφορες τιμές των σταθερών, δεν δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα για την πλειοψηφία των προσομοιώσεων, με εξαίρεση τα αποτελέσματα Run 1.9 και Run 1.10, που ικανοποιούν την ποιότητα εκροής τόσο για το υπολειμματικό

χλώριο όσο και για τη συγκέντρωση των ολικών κολοβακτηρίων, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχήμα 8.19.

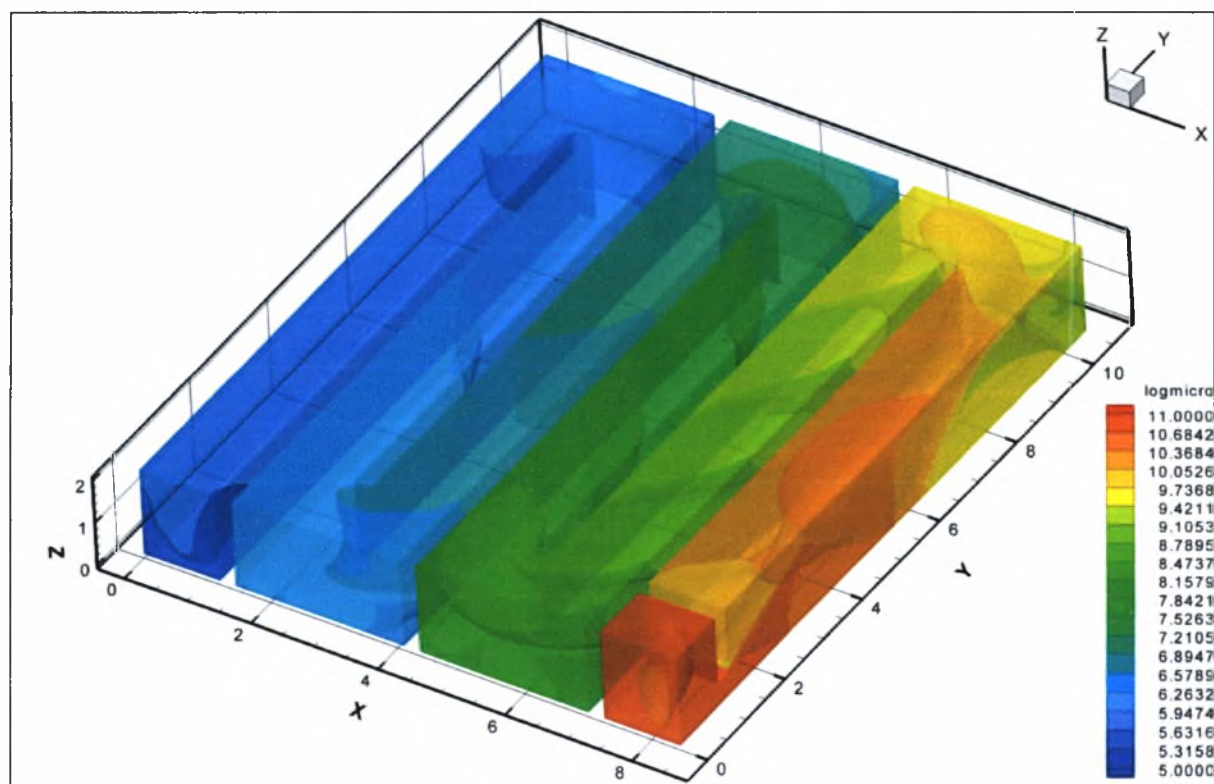


Σχήμα 8.19 Υπολειμματικό χλώριο και συγκέντρωση TC (total coliforms) στην έξοδο της δεξαμενής, με χρήση μοντέλου πρώτης τάξης για την περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου και του μοντέλου Chick–Watson για την περιγραφή της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών (SFO–CW). Δίνονται οι γραμμές σφάλματος-απόκλισης κατά 10%.

Η κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωρίου και των μικροοργανισμών δίνονται στα Σχήματα 8.20 και 8.21, αντίστοιχα, μόνο για την περίπτωση Run 1.10.



Σχήμα 8.20:Κατανομή συγκεντρώσεων υπολειμματικού χλωρίου με $k_{Cl_2}=0,001\text{ s}^{-1}$, Run 1.10



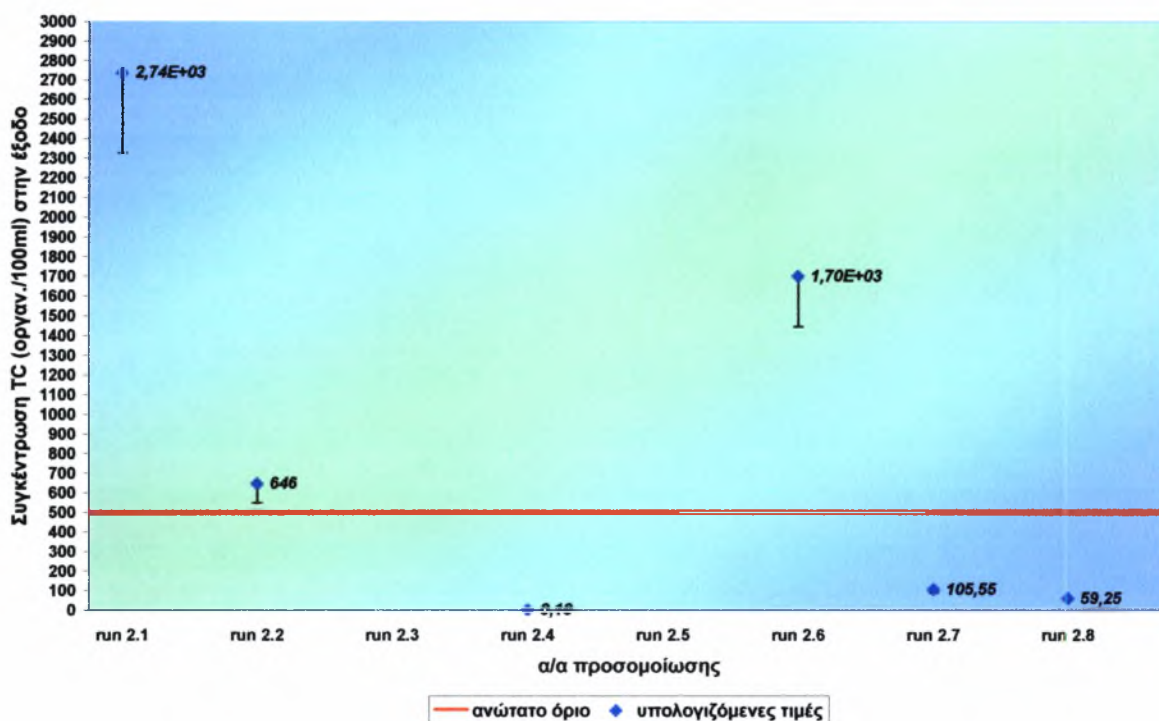
Σχήμα 8.21: Κατανομή συγκεντρώσεων ολικών κολοβακτηρίων (TC) με $k_{Cl_2}=0,001\text{ s}^{-1}$ και $Kn = 6,276$, $n = 1,1$ (Run 1.10)

Η δεύτερη ομάδα προσομοιώσεων (Run 2) διεξήχθη διατηρώντας το μοντέλο Chick-Watson για την περιγραφή της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, κάνοντας όμως πλέον χρήση του μοντέλου παράλληλης πρώτης τάξης, για την περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου (συνδυασμός μοντέλων PFO-CW). Οι αντίστοιχες προβλεπόμενες τιμές των συγκεντρώσεων στην έξοδο της δεξαμενής, για τις διάφορες τιμές των σταθερών των μοντέλων, συνοψίζονται στον Πίνακα 8.5.

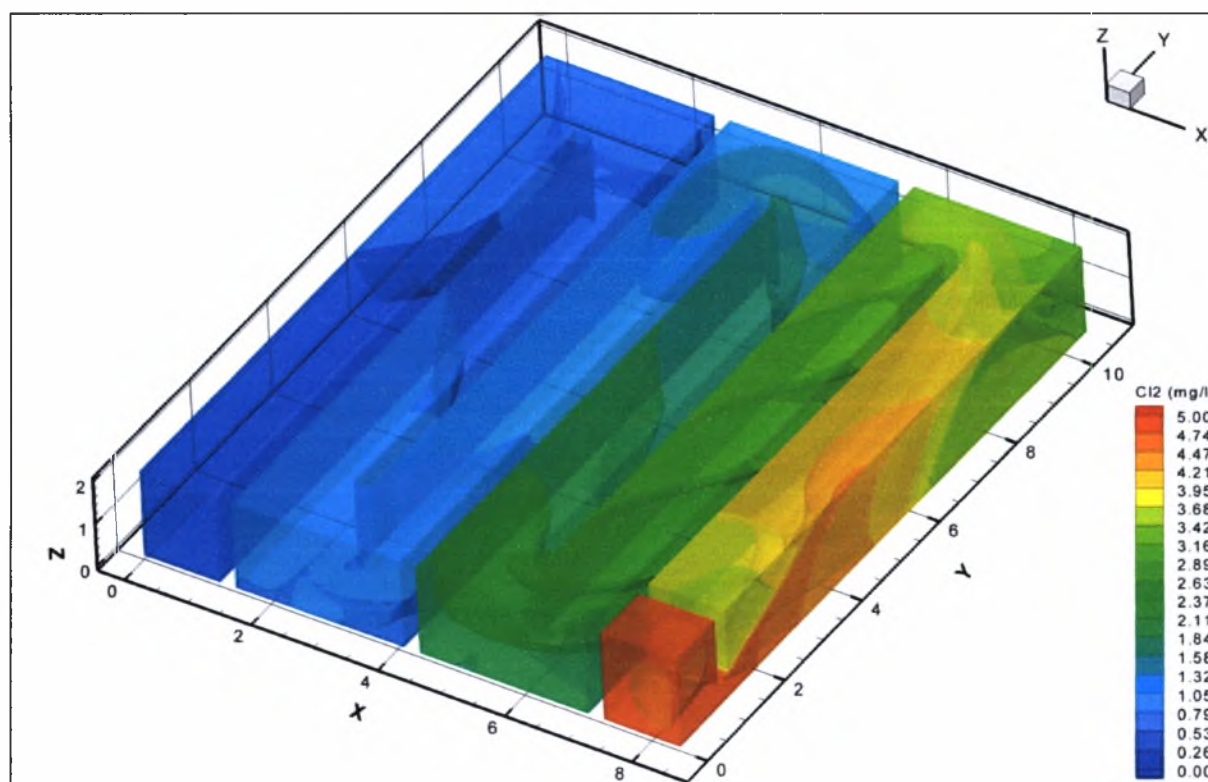
Πίνακας 8.5: Ποιότητα της εκροής, για περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου με κινητική παράλληλης πρώτης τάξης και της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών με μοντέλο Chick – Watson (PFO-CW).

Run 2	Cl ₂ – Parallel first order		Chick-Watson	Συμβολισμός ζεύγους μοντέλων : PFO-CW	
	$\frac{dC_R}{dt} = -k_R \cdot C^n$ (γρήγορο)		$\frac{dN_t}{dt} = -k_n \cdot C^n \cdot N_t$	ΕΞΟΔΟΣ	
	$\frac{dC_S}{dt} = -k_S \cdot C^m$ (αργό)				
	x_{rapid} = 0,1			Cl2 (mg/l)	Μικροοργ./100 ml
	KCl _{2,rapid}	KCl _{2,slow}	Kn & n		
2.1	0,016 s ⁻¹	0,00005 s ⁻¹	6,276 & 1,1	0,237	2,74E+03
2.2	0,016 s ⁻¹	0,00005 s ⁻¹	10,93 & 1,16	0,237	646
2.3	0,016 s ⁻¹	0,00005 s ⁻¹	3,478 & 1,1	0,236	8,52E+04
2.4	0,016 s ⁻¹	0,00005 s ⁻¹	13,05 & 1,07	0,235	0,10
2.5	0,016 s ⁻¹	0,00005 s ⁻¹	10,52 & 1,37	0,237	5,71E+05
2.6	0,016 s ⁻¹	0,00005 s ⁻¹	11,15 & 1,18	0,235	1,70E+03
2.7	0,0132 s ⁻¹	0,000029 s ⁻¹	10,93 & 1,16	0,405	105,55
2.8	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	10,93 & 1,16	0,464	59,25

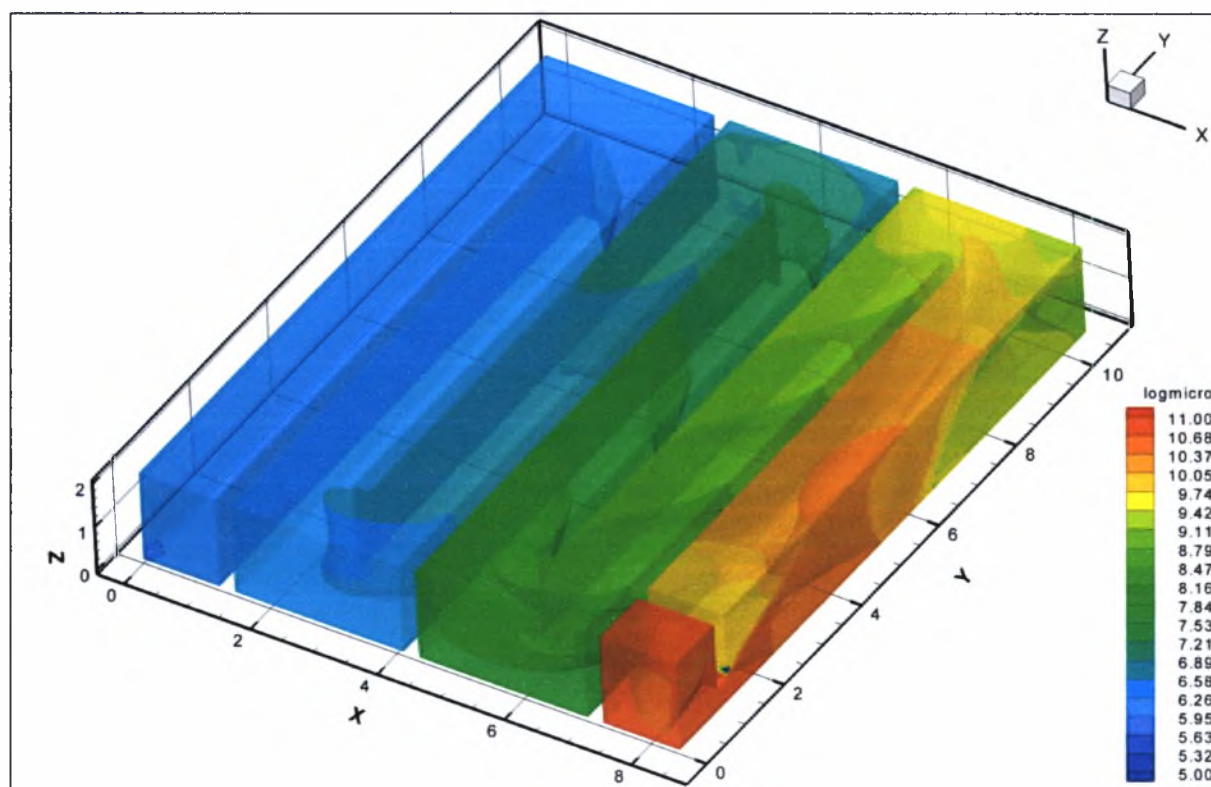
Γίνεται σαφές πως το μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης έδωσε μια πολύ καλύτερη και ακριβέστερη περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου, ικανοποιώντας την συγκέντρωση του υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο της δεξαμενής. Παρατηρήθηκαν επίσης περισσότερα από ένα ζεύγη τιμών που ικανοποιούν την θεωρητική απενεργοποίηση των κολοβακτηρίων, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχήμα 8.22, με κυριότερα τα Run 2.7 και 2.8.



Σχήμα 8.22 Συγκέντρωση TC (total coliforms) στην έξοδο της δεξαμενής, με τη χρήση μοντέλου παράλληλης πρώτης τάξης για την περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου και του μοντέλου Chick – Watson για την περιγραφή της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών (PFO-CW). Δίνονται οι γραμμές σφάλματος-απόκλισης κατά 10%.



Σχήμα 8.23: Κατανομή συγκέντρωσης υπολειμματικού χλωρίου με $k_{Cl2,rapid}=0,00132 \text{ s}^{-1}$, $k_{Cl2,slow}=2,9 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ και $x_{rapid}=0,1$ (Run 2.7).



Σχήμα 8.24: Κατανομή συγκέντρωσης ολικών κολοβακτηρίων (TC) με $k_{\text{Cl}_2, \text{rapid}} = 0,00132 \text{ s}^{-1}$, $k_{\text{Cl}_2, \text{slow}} = 2,9 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $x_{\text{rapid}} = 0,1$, $\text{Kn} = 10,93$, $n = 1,16$ (Run 2.7).

Από την μέχρι στιγμής λοιπόν εξέταση των μαθηματικών μοντέλων διαπιστώθηκε η ανεπάρκεια του μοντέλου πρώτης τάξης να περιγράψει ικανοποιητικά την απομείωση του χλωρίου, δίνοντας σχετικά αργούς ρυθμούς απομείωσης και κατ' επέκταση υψηλές τιμές συγκέντρωσης υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο και ως συνέπεια αυτού σχετικά μηδενικές τιμές για τη συγκέντρωση των μικροοργανισμών. Η χρήση του μοντέλου παράλληλης πρώτης τάξης για την περιγραφή της απομείωσης της χλωρίου, έδωσε πολύ καλύτερα αποτελέσματα, ικανοποιώντας την αναμενόμενη εκροή σε υπολειμματικό χλώριο.

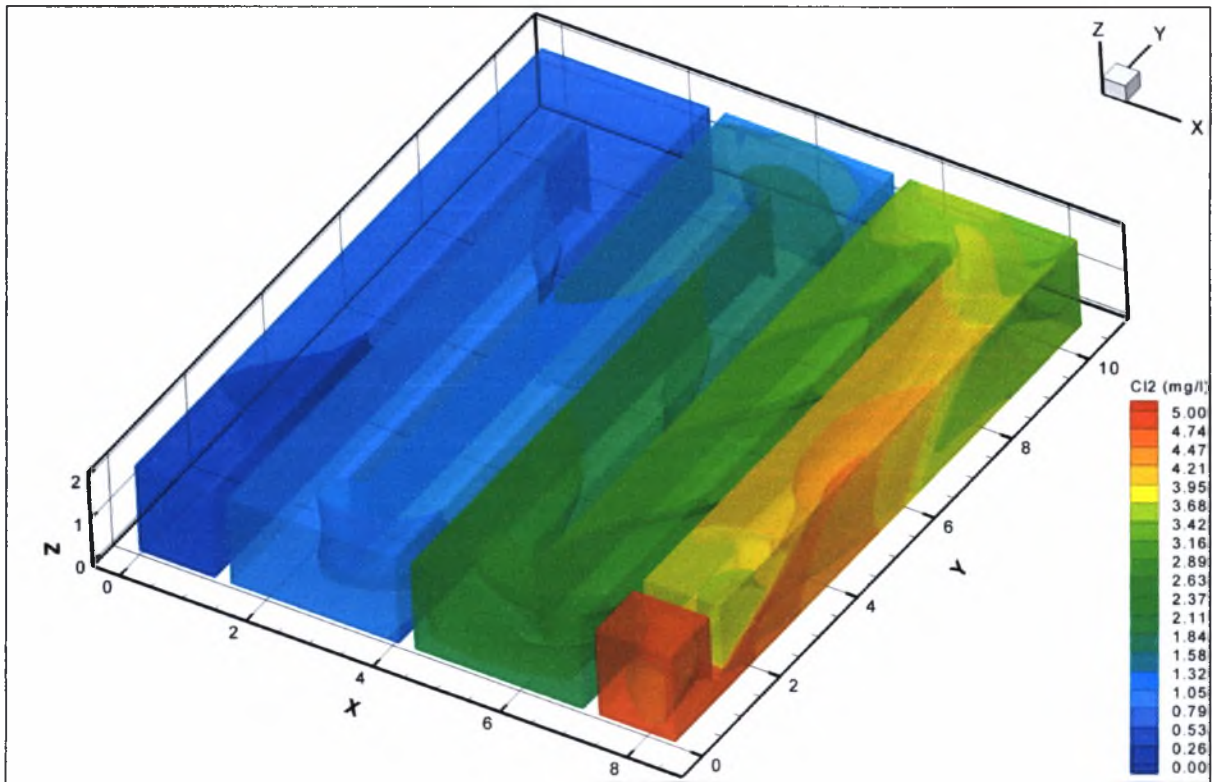
Οι επόμενες ομάδες προσομοιώσεων (Run 3 και 4) διεξήχθησαν κάνοντας χρήση του μοντέλου Collins – Selleck για την περιγραφή της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών και του μοντέλου πρώτης τάξης και παράλληλης πρώτης τάξης για την περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου, αντίστοιχα. Οι τιμές των σταθερών των μοντέλων, για κάθε προσομοίωση που διεξήχθη, συγκεντρώνονται στον Πίνακα 8.6, όπου δηλώνεται επίσης η υπολογιζόμενη ποιότητα της εκροής. Η ανάλυση των αποτελεσμάτων ενισχύει την άποψη πως η χρήση του απλού μοντέλου πρώτης τάξης για την περιγραφή της απομείωσης του χλωρίου αδυνατεί να αποδώσει ρεαλιστικά την πραγματική κατάσταση. Επιπρόσθετα, διαπιστώνεται πως το μοντέλο Collins – Selleck προσεγγίζει με μεγαλύτερη επιτυχία το

θεωρητικά αναμενόμενο προφίλ των συγκεντρώσεων των μικροοργανισμών σε σχέση με το μοντέλο των Chick-Watson.

Πίνακας 8.6: Ποιότητα εκροής, για περιγραφή απομείωσης του χλωρίου με κινητική πρώτης & παράλληλης πρώτης τάξης και της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών με μοντέλο Collins-Selleck (SFO-CS & PFO-CS).

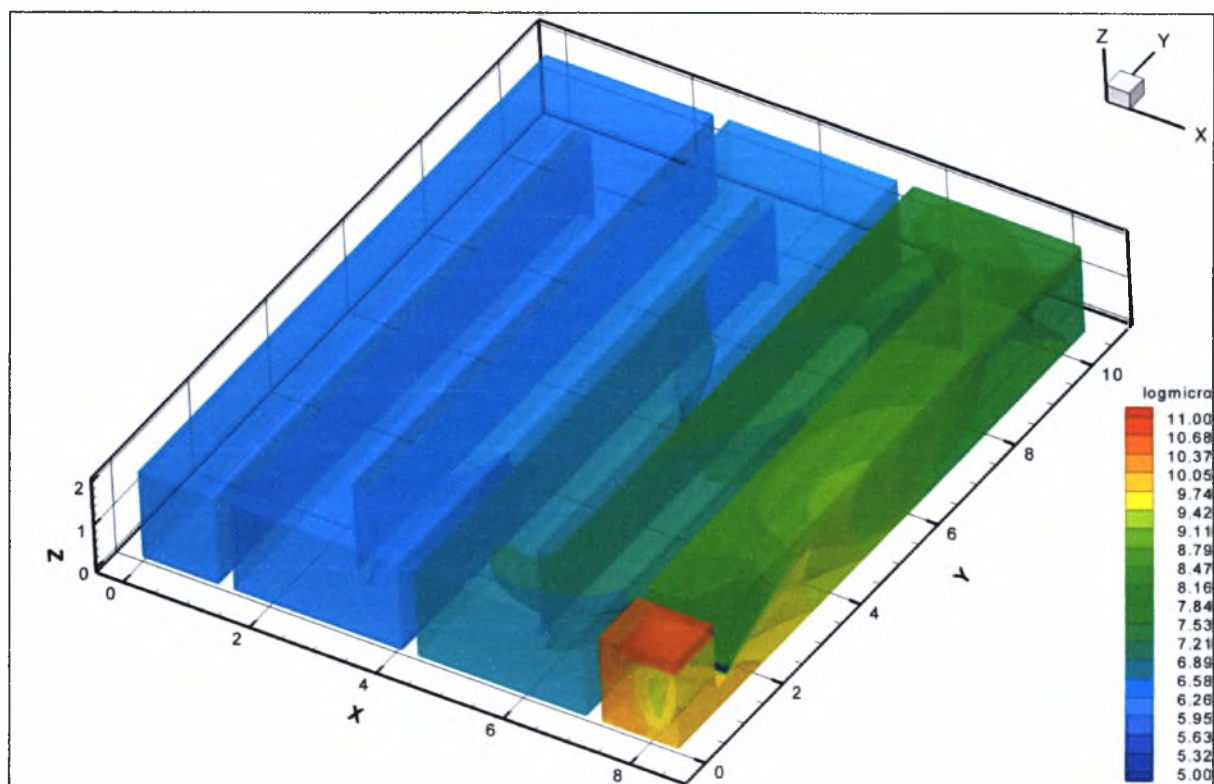
Run 3	Cl ₂ –Simple first order		Collins - Selleck		Συμβολισμός ζεύγους μοντέλων : SFO-CS	
	$C = C_0 \cdot \exp(-k' t)$		$-\frac{dS}{dt} = \frac{nC}{b} \cdot S^{(n+1)/n}$		ΕΞΟΔΟΣ	
	KCl ₂		b	n	Cl2 (mg/l)	Μικροοργ./100 ml
3.1	0,0008 s ⁻¹		0,476	5,24	1,10	76,78
3.2	0,0008 s ⁻¹		0,05	2,10	1,10	950
3.3	0,0008 s ⁻¹		0,244	2,82	1,10	2.952
3.4	0,0008 s ⁻¹		0,31	3,15	1,10	2.312
3.5	0,0008 s ⁻¹		0,039	1,62	1,10	5.209
3.6	0,0008 s ⁻¹		0,102	2,35	1,10	1.623
Run 4	Cl ₂ – Parallel first order		Collins - Selleck		Συμβολισμός ζεύγους μοντέλων : PFO-CS	
	$\frac{dC_R}{dt} = -k_R \cdot C^n$ (γρήγορο) $\frac{dC_S}{dt} = -k_S \cdot C^m$ (αργό)		$-\frac{dS}{dt} = \frac{nC}{b} \cdot S^{(n+1)/n}$		ΕΞΟΔΟΣ	
	x _{rapid} = 0,1				Cl2 (mg/l)	micro (οργ./100 ml)
	KCl _{2,rapid}	KCl _{2,slow}	b	n		
4.1	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,31	3,15	0,463	6.120
4.2	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,244	2,82	0,463	7.187
4.3	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,132	2,22	0,463	9.332
4.4	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,10	2,82	0,463	708
4.5	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,05	2,10	0,463	1.935
4.6	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,05	2,82	0,463	108
4.7	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,039	1,62	0,463	9.021
4.8	0,012 s ⁻¹	0,00008 s ⁻¹	0,476	5,24	0,463	360

Στα Σχήματα 8.25 έως 8.27 δίνονται οι κατανομές των συγκεντρώσεων του υπολειμματικού χλωρίου και των μικροοργανισμών για τις προσομοιώσεις Run 4.6 και 4.8.

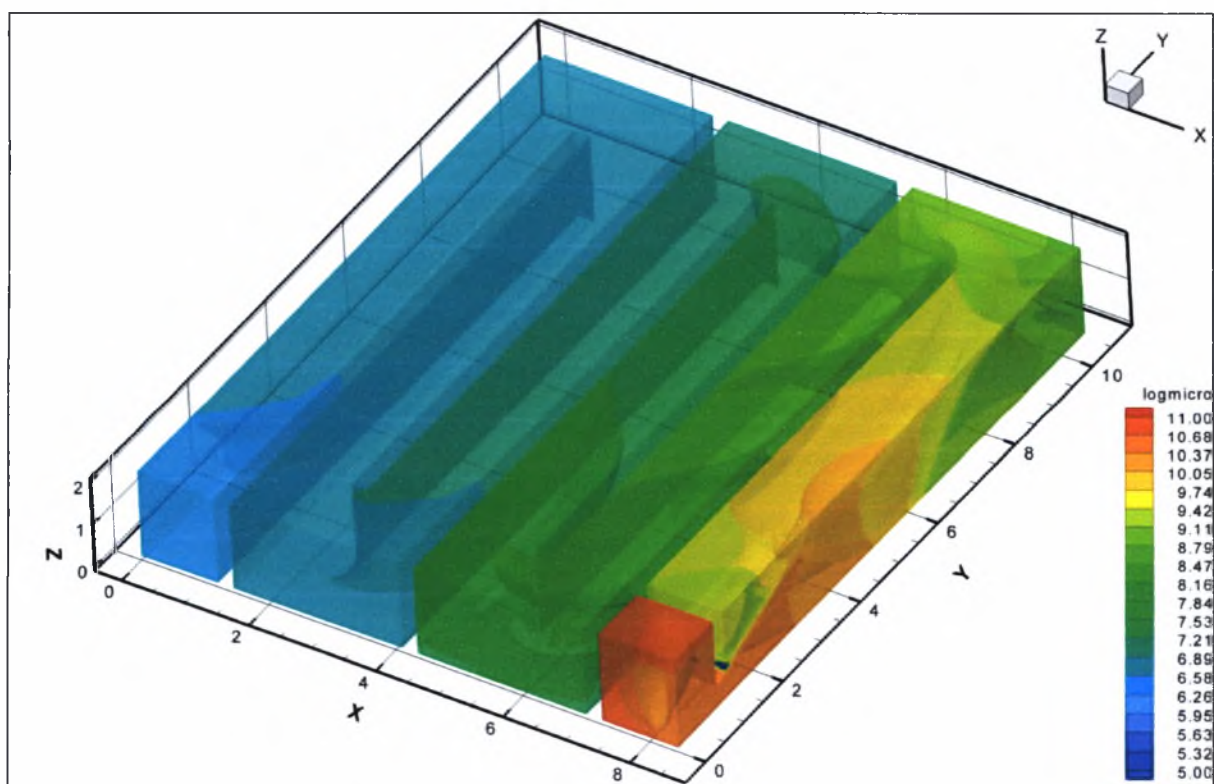


Σχήμα 8.25: Κατανομή συγκέντρωσης υπολειμματικού Cl_2 με $k_{\text{Cl}_2, \text{rapid}}=0,0012 \text{ s}^{-1}$, $k_{\text{Cl}_2, \text{slow}}=8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $x_{\text{rapid}}=0,1$

Όπως μπορεί κανείς να διαγνώσει από την προσεκτική ανάλυση των Σχημάτων 8.25 έως 8.27, η απομείωση του χλωρίου δεν ακολουθεί ομοιόμορφη κατανομή στο ύψος της δεξαμενής. Είναι ταχύτερη κοντά στην ελεύθερη επιφάνεια και βραδύτερη στον πυθμένα, λόγω των χαμηλότερων εκεί ταχυτήτων. Αυτή η συμπεριφορά ενισχύει την 3Δ αντιμετώπιση του προβλήματος καθώς, η διδιάστατη θεώρηση αδυνατεί να προβλέψει την διαστρωμάτωση της ροής στην τρίτη διεύθυνση. Οι μεγαλύτερες συγκεντρώσεις χλωρίου σημειώνονται στα πρώτα 3 διαμερίσματα της δεξαμενής, ενώ ο ρυθμός απομείωσης του ελαττώνεται προοδευτικά κατά μήκος της διαδρομής. Η πτώση του ρυθμού αυτού γίνεται εντονότερη στις καμπές της διαδρομής (στροφές) κατά τις οποίες εμφανίζονται ανακυκλοφορίες που παγιδεύουν ποσότητες ρευστού με ταχύτητα μικρότερη από την μέση επικρατούσα ταχύτητα.



Σχήμα 8.26: Κατανομή συγκέντρωσης ολικών κολοβακτηρίων (TC) με $k_{Cl2,rapid}=0,0012 \text{ s}^{-1}$, $k_{Cl2,slow}=8*10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $x_{rapid}=0,1$, $b = 0,05$, $n = 2,82$ (Run 4.6).



Σχήμα 8.27: Κατανομή συγκέντρωσης ολικών κολοβακτηρίων (TC) με $k_{Cl2,rapid}=0,0012 \text{ s}^{-1}$, $k_{Cl2,slow}=8*10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $x_{rapid}=0,1$, $b = 0,476$, $n = 5,24$ (Run 4.8).

Η αρχική συγκέντρωση μικροοργανισμών, υφίσταται ισχυρή απομείωση στο χωρίο ανάμιξης λόγω της ισχυρής παρουσίας χλωρίου και της έντονης ανάμιξης. Η πτώση της συγκέντρωσης των παθογόνων μικροοργανισμών γίνεται με μηχανισμό όμοιο με αυτόν που περιγράφηκε στην περίπτωση του χλωρίου.

9. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

9.1. Συμπεράσματα

Η συνεχώς αυξανόμενη υπολογιστική ισχύς οδήγησε στην καθιέρωση της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD), ως ένα αποτελεσματικό εργαλείο στην ανάλυση της συμπεριφοράς σύνθετου εξοπλισμού. Στην περίπτωση της απολύμανσης αστικών λυμάτων η εφαρμογή της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής επιτρέπει τη διάγνωση του τρόπου με τον οποίο το νερό κινείται εντός των δεξαμενών επαφής. Επιπλέον επιτρέπει την ολοκληρωμένη αντιμετώπιση της διεργασίας της απολύμανσης λαμβάνοντας υπόψη τόσο τις χωρικές όσο και τις φυσικο-χημικές παραμέτρους, που διέπουν τις ροές αυτού του τύπου. Με άλλα λόγια η απόδοση των δεξαμενών επαφής εξαρτάται τόσο από το πεδίο ροής όσο και από τις χημικές ή βιολογικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στη δεξαμενή. Το πεδίο ροής ελέγχει την μεταφορά του απολυμαντικού μέσου (χλωρίου), ενώ η κίνηση και διασπορά του απολυμαντικού προκαλεί την απενεργοποίηση των βακτηρίων. Οι βιβλιογραφικές αναφορές για την εκτίμηση του πεδίου της ροής της διεργασίας της απολύμανσης σε δεξαμενές επαφής με τη χρήση αριθμητικών μοντέλων είναι περιορισμένες και απέχουν χρονικά μεταξύ τους ενώ στηρίζονται συνήθως στην εφαρμογή ενός διδιάστατου μέσου βάθους αριθμητικού μοντέλου, για την πρόβλεψη του πεδίου ταχυτήτων και της χωροταξικής διανομής των συγκεντρώσεων ενός ιχνηθέτη.

Σκοπός της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας ήταν η ανάπτυξη του απαραίτητου 3Δ μαθηματικού μοντέλου για την προσομοίωση των φαινομένων ροής και μεταφοράς σε μια δεξαμενή χλωρίωσης αστικών λυμάτων. Με τη βοήθεια της CFD ανάλυσης η υδραυλική συμπεριφορά (μεταφορά) των δεξαμενών επαφής και των διεργασιών απολύμανσης που λαμβάνουν χώρα σε αυτές, μπορούν να ελεγχθούν και να επαναπροσδιοριστούν αναλόγως από τη φάση του σχεδιασμού. Δεν απαιτείται η χρήση παραδοχών κατά τον θεωρητικό υπολογισμό (π.χ. θεώρηση ιδανικού πεδίου ροής) αλλά ούτε και η εξαγωγή του πραγματικού πεδίου ροής από τις RTD καμπύλες (διεξαγωγή επί τόπου πειραμάτων έγχυσης ιχνηθέτη) μετά την κατασκευή των δεξαμενών. Επιπροσθέτως, η εφαρμογή του μαθηματικού μοντέλου που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία, περιορίζει στο ελάχιστο τις πιθανότητες για ελλειμματικό σχεδιασμό και επιτρέπει την επιλογή της βέλτιστης λύσης αναφορικά με την αρχική επένδυση, το λειτουργικό κόστος (κατανάλωση του απολυμαντικού μέσου) και την απόδοση απενεργοποίησης των μικροοργανισμών. Τέλος, εξετάστηκε η επίδραση των

διαφορετικών κινητικών μοντέλων (κινητική απενεργοποίησης μικροοργανισμών και κινητική απομείωσης του χλωρίου), στην περιγραφή της διεργασίας της απολύμανσης.

Από τα αποτελέσματα και τη συζήτηση που παρουσιάστηκαν στο Κεφάλαιο 8, μπορούν να διατυπωθούν τα παρακάτω γενικά συμπεράσματα:

1) Αναπτύχθηκε μαθηματικό μοντέλο ροής, τύρβης και διεργασιών απομείωσης απολυμαντικού μέσου και μικροβιακού φορτίου για διδιάστατες και τρισδιάστατες προσομοιώσεις δεξαμενής χλωρίωσης αστικών λυμάτων. Συγκεκριμένα αναπτύχθηκε εξωτερικός πηγαίος κώδικας (user define functions) που προβλέπει δύο κινητικές περιγραφές της απομείωσης του χλωρίου μείζονος ενδιαφέροντος (τα αποτελέσματα των οποίων παρουσιάζονται στην παρούσα εργασία). Παράλληλα παρουσιάζονται δύο κινητικές περιγραφές της απενεργοποίησης του μικροβιακού φορτίου.

2) Διαπιστώθηκε ο ισχυρά 3Δ χαρακτήρας της ροής κυρίως στο θάλαμο αρχικής ανάμιξης και στα πρώτα διαμερίσματα της δεξαμενής χλωρίωσης επιβεβαιώνοντας έτσι την αδυναμία του διδιάστατου μοντέλου να προσομοιώσει ικανοποιητικά τη ροή στα τμήματα αυτά. Επιπρόσθετα, οι παραγόμενες ανακυκλοφορίες, τόσο στα σημεία αναστροφής της ροής όσο και στις ορθές γωνίες της δεξαμενής, εκτείνονται σε όλο σχεδόν το βάθος του υγρού (κατακόρυφες ανακυκλοφορίες), ενισχύοντας έτσι την απαίτηση για παραγωγή ενός τρισδιάστατου μοντέλου για την ορθή απόδοση των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών της δεξαμενής επαφής.

3) Οι μέγιστες τιμές της ταχύτητας συναντώνται στην είσοδο του θαλάμου αρχικής ανάμιξης, στην στένωση που δημιουργείται από το τοίχιο υποχείλισης ακριβώς πριν την είσοδο του ρευστού στο κυρίως τμήμα της δεξαμενής και τέλος στο πρώτο μισό του πρώτου διαμερίσματος της δεξαμενής επαφής με διεύθυνση από τα κατώτερα προς ανώτερα στρώματα του ρευστού. Τα διαχωριστικά τοιχία οδηγούν σε απότομες αλλαγές στη διεύθυνση της ροής, με αποτέλεσμα το ρευστό να εμφανίζει μια αυξημένη ταχύτητα στο εξωτερικό της στροφής σε σχέση με το εσωτερικό, και ως συνέπεια αυτού την ανάπτυξη ολκών πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία και την παγίδευση ρευστού. Σημαντικές διαφοροποιήσεις στην ταχύτητα μπορούν επίσης να προκληθούν εξαιτίας της περιορισμένης διατομής εξόδου της δεξαμενής.

4) Οι κύριες ζώνες ανακυκλοφορίας της ροής παρατηρούνται στην περιοχή μεταξύ του θαλάμου αρχικής ανάμιξης και του πρώτου διαμερίσματος της δεξαμενής (αμέσως μετά το τοιχίο υποχειλίστης), στα σημεία ένωσης των εξωτερικών τοιχίων της δεξαμενής με τα εσωτερικά διαχωριστικά τοιχία (γωνίες 90°) καθώς και στο πίσω μέρος (προς την διεύθυνση της ροής) των εσωτερικών διαχωριστικών τοιχίων (baffles) και συγκεκριμένα στα σημεία αλλαγής της διεύθυνσης της ροής ως αποτέλεσμα της αποκόλλησης της ροής. Η έκταση των προβλεπόμενων ανακυκλοφοριών είναι πιο έντονη αμέσως μετά το τοιχίο υποχειλίστης, κατόπιν στα σημεία πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία και μικρότερη στις ορθές γωνίες στην αρχή και στο τέλος κάθε διαμερίσματος. Οι ανακυκλοφορίες αυτές αναπτύσσουν νεκρές ζώνες παγίδευσης ρευστού οι μεγαλύτερες από τις οποίες έχουν σημαντική επίπτωση στην απόδοση των δεξαμενών επαφής καθώς οδηγούν σε σημαντική απόκλιση από την εμβολική ροή.

5) Ισχυρή τύρβη παρουσιάστηκε στην περιοχή μεταξύ του θαλάμου αρχικής ανάμιξης και του πρώτου διαμερίσματος της δεξαμενής, κυρίως εξαιτίας των έντονων ανακυκλοφοριών που παρουσιάζει η ροή στην περιοχή αυτή. Εν συνεχεία, οι περιοχές που διαγνώστηκαν χαμηλότερα επίπεδα τύρβης, είναι αμέσως μετά από τα εσωτερικά διαχωριστικά τοιχία (στο πίσω μέρος των διαχωριστικών τοιχίων προς την διεύθυνση της ροής) εξαιτίας της εκτροπή της ροής από το διαχωριστικό τοιχίο. Γενικά η τύρβη από το διαμέρισμα 2 και μετά διατηρείται σχεδόν σταθερή εξαιτίας δύο άλλων μηχανισμών γέννησης τύρβης, που είναι η επιτάχυνση-επιβράδυνση στις γειτονικές περιοχές μεταξύ των διαμερισμάτων και οι ανακυκλοφορίες της ροής στα σημεία πίσω από τα διαχωριστικά τοιχία.

6) Η χρήση διαφόρων συνδυασμών κινητικών μοντέλων αλλά και διαφορετικών τιμών για τις σταθερές των κινητικών μοντέλων επηρέασε σημαντικά την παραγόμενη κατανομή συγκεντρώσεων του απολυμαντικού μέσου και των μικροοργανισμών.

7) Διαπιστώθηκε αδυναμία του μοντέλου πρώτης τάξης να περιγράψει ικανοποιητικά την απομείωση του χλωρίου, δίνοντας σχετικά αργούς ρυθμούς απομείωσης και κατ' επέκταση υψηλές τιμές συγκέντρωσης υπολειμματικού χλωρίου στην έξοδο και ως συνέπεια αυτού σχετικά μηδενικές τιμές για τη συγκέντρωση των μικροοργανισμών. Η χρήση του μοντέλου παράλληλης πρώτης τάξης για την περιγραφή της απομείωσης της χλωρίου, έδωσε πολύ καλύτερα αποτελέσματα, ικανοποιώντας την αναμενόμενη εκροή

σε υπολειμματικό χλώριο. Το συμπέρασμα αυτό έρχεται να επιβεβαιώσει τις κινητικές μελέτες που έχουν διεξαχθεί οι οποίες στο σύνολό τους προάγουν το μοντέλο παράλληλης πρώτης τάξης ως το πλέον κατάλληλο για την ακριβή περιγραφή της διεργασίας απομείωσης του χλωρίου.

8) Το μοντέλο Collins – Selleck προσεγγίζει με μεγαλύτερη επιτυχία το θεωρητικά αναμενόμενο προφίλ των συγκεντρώσεων των μικροοργανισμών σε σχέση με το μοντέλο των Chick-Watson. Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί πως σε αντιδιαστολή με το απλό μοντέλο των Chick-Watson και το απλό μοντέλο Collins – Selleck που αναπτύχθηκαν με τη θεώρηση σταθερής συγκέντρωσης απολυμαντικού, τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν στον εξωτερικό πηγαίο κώδικα λαμβάνουν υπόψη και την απομείωση της συγκέντρωσης του απολυμαντικού μέσου (πρώτης ή παράλληλης πρώτης τάξης). Ο συνδυασμός του κινητικού μοντέλου παράλληλης πρώτης τάξης και του μοντέλου των Collins - Selleck μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ο πλέον κατάλληλος για την εξαγωγή της κατανομής της συγκεντρώσεως του χλωρίου και των μικροοργανισμών σε δεξαμενές επαφής και την πρόβλεψη της αναμενόμενης εκροής με το μικρότερο δυνατό σφάλμα.

9) Εφόσον δεν υπάρχουν διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις που θα επέτρεπαν τον προσδιορισμό των σταθερών των προαναφερόμενων κινητικών μοντέλων απαιτείται η προσεχτική επιλογή των σταθερών αυτών από βιβλιογραφικές πηγές για συνθήκες όσο το δυνατόν πιο κοντά στην εκάστοτε προσομοίωση (αναφορικά με το είδος των βακτηρίων που μελετώνται, τη μορφή του χλωρίου που χρησιμοποιείται, τη θερμοκρασία, το pH και τη φυσικο-χημική σύσταση του προς επεξεργασία αποβλήτου κ.ο.κ.).

10) Στο χώρο ανάμιξης εμφανίζεται η μεγαλύτερη κατανάλωση του απολυμαντικού μέσου λόγω της ισχυρής ανακυκλοφορίας και ανάμιξης. Οι μεγαλύτερες συγκεντρώσεις χλωρίου σημειώνονται στα πρώτα 3 διαμερίσματα της δεξαμενής, ενώ ο ρυθμός απομείωσής του ελαττώνεται προοδευτικά κατά μήκος της διαδρομής. Η πτώση του ρυθμού αυτού γίνεται εντονότερη στις καμπές της διαδρομής (στροφές) κατά τις όποιες εμφανίζονται ανακυκλοφορίες που παγιδεύουν ποσότητες ρευστού με ταχύτητα μικρότερη από την μέση επικρατούσα ταχύτητα. Η απομείωση του χλωρίου δεν ακολουθεί ομοιόμορφη κατανομή στο ύψος της δεξαμενής. Είναι ταχύτερη κοντά στην ελεύθερη επιφάνεια και βραδύτερη στον πυθμένα, λόγω των χαμηλότερων εκεί ταχυτήτων. Αυτή η συμπεριφορά ενισχύει την 3Δ αντιμετώπιση του προβλήματος καθώς,

η διδιάστατη θεώρηση αδυνατεί να προβλέψει την διαστρωμάτωση της ροής στην τρίτη διεύθυνση.

11) Η αρχική συγκέντρωση των μικροοργανισμών, υφίσταται ισχυρή απομείωση στο χωρίο ανάμιξης λόγω της ισχυρής παρουσίας χλωρίου και της έντονης τοπικής ανάμιξης. Η πτώση της συγκέντρωσης των παθογόνων μικροοργανισμών γίνεται με μηχανισμό όμοιο με αυτόν που περιγράφηκε στην περίπτωση του χλωρίου. Η πτώση του ρυθμού απενεργοποίησης σημειώνεται στα σημεία που η ροή επιβραδύνεται λόγω γεωμετρικών εμποδίων και σε περιοχές με μικρή τοπική συγκέντρωση απολυμαντικού μέσου, ενώ η απενεργοποίηση πραγματοποιείται ταχύτερα κοντά στην ελεύθερη επιφάνεια από ότι στον πυθμένα, γεγονός που αναδεικνύει το μειονέκτημα των διδιάστατων προσομοιώσεων μέσου βάθους.

9.2. Προτάσεις για μελλοντική διερεύνηση

Η υπολογιστική προσέγγιση βοήθησε στον εμπλουτισμό των γνώσεων αναφορικά με την υδροδυναμική συμπεριφορά και την απόδοση της δεξαμενής επαφής που μελετήθηκε. Διαπιστώθηκαν όμως παράλληλα κάποιες ελλείψεις που πρέπει να επιλυθούν μελλοντικά. Οι παρακάτω προτάσεις αφορούν αφενός την βελτίωση του παραγόμενου μαθηματικού μοντέλου και αφετέρου τις ενδεχόμενες επεμβάσεις που θα επέτρεπαν την αύξηση της απόδοσης των δεξαμενών επαφής:

1) Η εγκυρότητα του καθενός από τα κινητικά μοντέλα περιορίζεται σε συνθήκες όμοιες με εκείνες που ελήφθησαν κατά την εξαγωγή του (αντιδραστήρες διαλείπουσας λειτουργίας ή συνεχούς ροής κ.ο.κ.) και αφετέρου οι παράμετροι (σταθερές) των κινητικών μοντέλων, που προκύπτουν γραφικά, εξαρτώνται από πλήθος παραγόντων όπως το είδος των βακτηρίων που μελετώνται, τη μορφή του χλωρίου που χρησιμοποιείται, τη θερμοκρασία, το pH και τη χημική σύσταση του προς επεξεργασία αποβλήτου κ.ο.κ. Στην εν λόγω μεταπτυχιακή εργασία οι τιμές των σταθερών των κινητικών περιγραφής της απομείωσης του χλωρίου και της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών ελήφθησαν από δεδομένα της βιβλιογραφίας για συνθήκες παραπλήσιες με τις δικές μας. Θα είχε ενδιαφέρον οι παραπάνω παράγοντες που επηρεάζουν τις σταθερές των κινητικών μοντέλων και κατ' επέκταση τους ρυθμούς απομείωσης του

χλωρίου και της απενεργοποίησης των μικροοργανισμών να μοντελοποιηθούν επιλύοντας περισσότερες εξισώσεις βαθμωτών μεγεθών.

2) Τόσο η εξίσωση μεταφοράς του χλωρίου όσο και η εξίσωση μεταφοράς και απενεργοποίησης των μικροοργανισμών, μοντελοποιούνται με δύο ξεχωριστές εξισώσεις βαθμωτού μεγέθους. Αμφότερες, οι εξισώσεις εμπεριέχουν τον αριθμό *Schmidt* ο οποίος ελήφθη σταθερός και ίσος με 0,9 που αποτελεί μια τιμή που προτάθηκε από τον Rodi (1980), για ροές κοντά σε τοιχώματα και τον Greene (2002). Η μεταβολή του αριθμού αυτού μπορεί να επηρεάσει σημαντικά την υπολογιζόμενη κατανομή των συγκεντρώσεων του χλωρίου και των μικροοργανισμών ιδίως αν η τυρβώδης διάχυση είναι υψηλή σε κάποιο τμήμα της δεξαμενής.

3) Στην προσπάθεια μοντελοποίησης που έγινε δεν ελήφθησαν υπόψη οι τυχόν θερμοκρασιακές μεταβολές, αν και αποτελεί σπάνιο γεγονός στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας αστικών λυμάτων. Οι μεταβολές της πυκνότητας ως αποτέλεσμα των θερμοκρασιακών διακυμάνσεων συντελούν στην ανάπτυξη μικρών ανακυκλοφοριών, με αποτέλεσμα την απόκλιση από την ιδανική εμβολική ροή. Συνεπώς θα ήταν ενδιαφέρουσα μια μελλοντική ανάπτυξη του μαθηματικού μοντέλου που θα εμπεριέχει και τις τυχόν αιφνίδιες θερμοκρασιακές διακυμάνσεις.

4) Προτείνεται η χρήση του μαθηματικού μοντέλου σε διαφορετικές διαμορφώσεις της δεξαμενής επαφής όσον αφορά την εξωτερική αλλά και εσωτερική της διάταξη με στόχο τον περιορισμό των στάσιμων ανακυκλοφοριών που διαγνώστηκαν και κατ' επέκταση την αύξηση της απόδοσης της απολύμανσης.

5) Η παροχή στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας αστικών λυμάτων μεταβάλλεται σημαντικά τόσο σε ημερήσια όσο και ωριαία βάση. Συνεπώς θα είχε ενδιαφέρον η μελέτη της απόδοσης της δεξαμενής επαφής υπό ένα συνεχώς μεταβαλλόμενο υδραυλικό φορτίο.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Arpaci V.S. and P.S. Larsen, 'Convection heat transfer', Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1984
2. AWWA Manual M20, 'Water chlorination principles and practices', American Water Works Association (AWWA), 1973
3. AWWA, 'The chlorination/chloramination handbook', American Water Works Association (AWWA), 1996
4. Chang E.E., P.C. Chiang, S.H. Chao and Y.L. Lin, 'Relationship between chlorine consumption and chlorination by-products formation for model products' Chemosphere, Article in press, 2006
5. Cho M., H. Chung and J. Yoon, 'Disinfection of water containing natural organic matter by using ozone-initiated radical reactions', Applied and Environmental Microbiology, Vol. 69, No. 4, pp. 2284-2291, Apr. 2003
6. Chorin A. J., 'A Numerical method for solving incompressible viscous flow problems', Journal of Computational Physics, 2:12-26, 1967
7. Courant R, K. O. Friedrichs & H. Lewy, 'On the partial difference equations of mathematical physics', IBM Journal, 215-234, March 1967
8. Degremont, 'Water Treatment Handbook', Fifth Edition, 1979
9. Do-Quang Z., A.Cockx, A.Line, M.Roustan, 'Computational fluid dynamics applied to water and wastewater treatment facility modeling', Environ Engg and Policy, Vol.1, pp. 137-147, 1999
10. Edward E.S., Anderson W.B., Andrews S.A. and Huck P.M., 'Disinfection assessment in full-scale chlorine contact chambers', J. Environ. Eng. Science Vol.1, pp.311- 322, (2002)
11. Falconer R.A. and A.I.B.M. Ismail, 'Numerical modelling of tracer transport in a contact tank', Environment International, Vol. 23, No. 6, pp. 763-773, 1997
12. Ferziger, J.H. and M. Peric, 'Computational Methods for Fluid Dynamics', ISBN: 3-540-42074-6, Springer-Verlag Berlin, 2001
13. Finch G.R., E.K. Black, L. Gyurek and M. Belosevic, 'Ozone inactivation of cryptosporidium parvum in demand-free by in vitro excystation and animal infectivity', Applied and Environmental Microbiology, Vol. 59, No. 12, pp. 4203-4210, Dec. 1993

14. Freitas C. J., R. L. Street, A. N. Findikakis & J. R. Koseff, 'Numerical simulation of three dimensional flow in a cavity', International Journal for Numerical Methods in Fluids, 5:561–575, 1985.
15. Gang D.C., T.E. Clevenger and S.K. Banerji, 'Journal of Environmental Informatics', Vol. 1, No. 1, pp. 21-27, 2003
16. Greene D.J., 'Numerical simulation of chlorine disinfection processes in non-ideal reactors', Doctoral Dissertation, Drexel University, Philadelphia 2002
17. Greene D.J., B. Farouk and C.N. Haas, 'CFD design approach for chlorine disinfection processes', J. AWWA, 96:8, August 2004
18. Gyurek L.L. and G.R. Finch 'Modeling water treatment chemical disinfection kinetics' Journal of Environmental Engineering, Vol. 124, No. 9, pp.783-793, September 1998
19. Haas C.N. and S.B. Karra, 'Kinetics of microbial inactivation by chlorine – I, *Review of results in demand-free systems*', Water Research, Vol. 18, No. 11, pp. 1443-1449, 1984a
20. Haas C.N. and S.B. Karra, 'Kinetics of microbial inactivation by chlorine – II, *Kinetics in the presence of chlorine demand*', Water Research, Vol. 18, No. 11, pp. 1451-1454, 1984b
21. Haas C.N. and S.B. Karra, 'Kinetics of wastewater chlorine demand exertion', Journal Water Pollution Control Federation, WPCF, Vol. 56, No. 2, pp. 170-173, 1984c
22. Haas C.N., *a discussion* 'Kinetics of bacterial deactivation with chlorine', Journal of the Environmental Engineering Division, *Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, ASCE, Vol. 104, No. EE6, pp. 1198-1199, December 1979
23. Haas C.N., J. Joffe, U. Ammangandla, J.G. Jacangelo and M. Heath, 'Water quality and disinfection kinetics', Journal AWWA, pp. 95-103, March 1996
24. Han T., J. A. C. Humphrey, & B. E. Launder, 'A comparison of hybrid and quadratic-upstream differencing in high Reynolds number elliptic flows', Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 29:81–95, 1981
25. Hannoun I.A., P.F. Boulos and J.E. List, 'Using hydraulic modelling to optimize contact time', J. AWWA, Vol.96, Issue 8, August 1998
26. Hart F.L. and Z. Vogiatzis, 'Performance of modified chlorine contact chamber' Journal of the Environmental Engineering Division, *Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, ASCE, Vol. 108, No. EE3, pp. 549-561, June 1992

27. Hart F.L., 'Tracer analysis of a final clarifier and a chlorine contact chamber', *presented at The AWWARF Tracer Study Workshop*, Denver, Co. July 17-18, 1994.
28. Hassen A., A. Heyouni, H. Shayeb, M. Cherif and A. Boudabous, 'Inactivation of indicator bacteria in wastewater by chlorine – a kinetics study', *Bioresource Technology*, Vol. 72, pp. 85-93, 2000
29. Hayase, T., Humphrey, J.A.C. and R., Grief, 'A consistently formulated QUICK Scheme for Fast and Stable Convergence Using Finite Volume Iterative Calculation Procedures', *Journal of Computational Physics*, 98:108-118, 1992
30. Hodge J.K., A.L. Stone & T.E. Miller, 'Numerical solution for airfoils near stall in optimized boundary-fitted curvilinear coordinates', *AIAA Journal*, 17,458:464, 1979
31. Hom L.W., 'Kinetics of chlorine disinfection in an ecosystem' *Journal of the Sanitary Engineering Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, Vol. 98, No. SA1, February 1972
32. Kaymak B., 'Effects of initial microbial density on disinfection efficiency and explanatory mechanisms', Thesis, Doctor of Philosophy, Drexel University, July 2003
33. Lambert R.J.W. and M.D. Johnston, 'Disinfection kinetics: a new hypothesis and model for the tailing of log-survivor/time curves', *Journal of Applied Microbiology*, Vol. 88, pp. 907-913, 2000
34. Leschziner M. A., 'Practical evaluation of three finite difference schemes for the computation of steady-state recirculating flow', *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 23:293–312, 1980
35. Li L., 'Effects of initial microbial density on disinfection efficiency in a continuous flow system and validation of disinfection batch kinetics in a continuous flow system', Thesis, Doctor of Philosophy, Drexel University, February 2004
36. Linsley R.K., J.B. Franzini, D.L. Freyberg, G. Tchobanoglous, 'Water – Resources Engineering' Fourth Edition, 1992, McGraw-Hill International Editions
37. Lyn D.A. and E.R. Blatchley, 'Numerical modelling of flow and disinfection in uv disinfection channels', *J. of Environmental Engineering*, pp. 17-26, 1999
38. Lyn D.A., and E.R. Blatchley, 'Numerical computational fluid dynamics - based models of ultraviolet disinfection channels', *J. of Environmental Engineering*, Vol.131:6, pp. 838-849, 2005
39. March J.G., M. Gual and J. Ramonell, 'A kinetic model for chlorine consumption in grey water', *Desalination*, Vol. 181, pp. 267-273, 2005

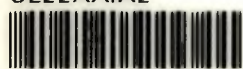
40. Metcalf & Eddy, 'Wastewater Engineering – Treatment / Disposal / Reuse', Third Edition, 1991, *Revised by Tchobanoglous G. & Burton F.I.*, McGraw Hill International Editions
41. Patankar S. V. & D. B. Spalding, 'A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows', *International Journal Heat & Mass Transfer*, 15:1787-1806, 1972
42. Patankar S. V., 'Numerical Heat Transfer and Fluid Flow', McGraw-Hill, New York, 1980, ISBN 0891165223
43. Patankar, S.V., 'A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations', *Numerical Heat Transfer*, 4:409-25, 1981
44. Perry R.H., D.W. Green, J.O. Maloney, 'Perry's Chemical Engineers Handbook', *Seventh Edition*, McGraw-Hill Companies, Inc. 1999
45. Pollard A. & A. L.-W. Siu, 'The calculation of some laminar flows using various discretisation schemes', *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 35:293–313, 1982
46. Pretorius P.C. and W.A. Pretorius, 'Disinfection of purified sewage effluent with monochloramine', *Water SA*, Vol. 25, No. 4, pp. 463-471, October 1999
47. Rahman, M.M., Miettinen, A. & T. Siikonen, 'Modified simple formulation on a collocated grid with an assessment of the simplified QUICK scheme', *Numerical Heat and Mass Transfer, Part B*, vol. 30:291-314, 1996
48. Roe P. L., 'Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes', *Journal of Computational Physics*, 43:357–372, 1981.
49. Selleck R.E., B.M. Saunier, H.F. Collins, 'Kinetics of bacterial deactivation with chlorine' *Journal of the Environmental Engineering Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, ASCE, Vol. 104, No. EE6, pp. 1197-1212, December 1978
50. Shiono K. and E.C. Texeira, 'Turbulent characteristics in a baffled contact tank', *Journal of Hydraulic Research*, Vol. 38, No. 4, pp. 271-278, 2000
51. Spalding D.B., 'A novel finite-difference formulation for different expressions involving both first and second derivatives', *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 4:551-559, 1972
52. Stamou I.A., 'On the prediction of flow and mixing in settling tanks using a curvature-modified k - ϵ model', *Appl. Math. Modelling*, Vol. 15, pp. 351-358, July 1991
53. Sundstrom D.W., Klei H.E., 'Wastewater Treatment', 1979, Prentice-Hall, Inc.

54. Tamamidis P. & D.N. Assanis, 'Evaluation of various high order accuracy schemes with and without flux limiters', International Journal for Numerical Methods in Fluids, 16:931-948, 1993
55. Thompson C.P. & N.S. Wilkes, 'Experiments with high order with order finite difference formulae', Technical Report AERE-R 10493, UKAEA Harwell, July 1982
56. U.S. EPA, 'Combined sewer overflow technology fact sheet – Chlorine Disinfection', EPA 832-F-99-034, September 1999
57. Van Der Walt J.J., 'The modelling of water treatment process tanks', Thesis, Doctor Ingenieriae in Civil Engineering, Rand Afrikaans University, May 2002
58. Van Doormaal, J.P. and Raithby, G.D., 'An evaluation of the segregated approach for predicting incompressible fluid flows', ASME Heat Transfer Conference, Denver, August 1985
59. Versteeg, H.K. and W. Malalasekera, 'An introduction to Computational Fluid Dynamics', Longman, London, 1995
60. Versteeg, H.K. and W. Malasekera, 'An introduction to Computational Fluid Dynamics', Longman Group Ltd, 1995
61. Vieira P., S.T. Coelho and D. Loureiro, 'Accounting for the influence of initial chlorine concentration, TOC, iron and temperature when modelling chlorine decay in water supply', Journal of Water Supply: Research & Technology-AQUA, Vol. 53, No. 7, pp. 453-467, 2004
62. Walas S.M., 'Chemical Process Equipment', *Selection and design*, Butterworth – Heinemann, 1990
63. Wang H. and R.A. Falconer, 'Numerical modelling of flow in chlorine disinfection tanks', Journal of Hydraulic Engineering, Vol. 124, No. 9, pp. 918-931, September 1998b
64. Wang H. and R.A. Falconer, 'Simulating disinfection processes in chlorine contact tanks using various turbulence models and high-order accurate difference schemes', Water Research, Vol. 32, No. 5, pp. 1529-1543, 1998a
65. Wang H., X. Shao and R.A. Falconer, 'Flow and transport simulation models for prediction of chlorine contact tank flow-through curves', Water Environment Research, Vol. 75, No. 5, pp. 455-471, September/October 2003
66. Warming R.F. & R.M. Beam, 'Upwind second order difference schemes and application in aerodynamic flows', AIAA Journal, 14:1241-1249, 1976

67. White G.C., 'Handbook of Chlorination and Alternative Disinfectants', John Wiley & Sons, Inc., 1999
68. Αγγελάκης Ν.Α., 'Διαχείριση Αστικών Υγρών Αποβλήτων', Ένωση Δημοτικών Επιχειρήσεων Ύδρευσης και Αποχέτευσης (Ε.Δ.Ε.Υ.Α.), Ιούνιος 2004
69. Κυπαρισσίδης Κ., 'Ανάλυση και Σχεδιασμός των Ομογενών Χημικών Αντιδραστήρων', Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Υπηρεσία Δημοσιευμάτων, Θεσσαλονίκη 1994
70. Λέκκας Δ.Θ., 'Περιβαλλοντική Μηχανική Ι - Διαχείριση Υδατικών Πόρων', Πανεπιστήμιο Αιγαίου, Τμήμα Περιβάλλοντος, Μυτιλήνη 1996
71. Μαρκαντωνάτος Γ., 'Επεξεργασία και διάθεση αποβλήτων', Αθήνα 1990
72. Μαρκόπουλος Ι.Ν., 'Μεταφορά Μάζας', β' έκδοση, University Studio Press, Θεσσαλονίκη 1997
73. Παπαϊωάννου Θ.Α., 'Μηχανική των Ρευστών', Β' Έκδοση, Τόμος ΙΙ, 2002
74. Στάμου Α.Ι. και Βογιατζής Σ.Ζ., 'Βασικές Αρχές και Σχεδιασμός Συστημάτων Επεξεργασίας Αποβλήτων' 2^η έκδοση, Έκδοση Τεχνικού Επιμελητηρίου Ελλάδος, Αθήνα 1994
75. Στάμου Α.Ι., 'Βιολογικός Καθαρισμός Αστικών Αποβλήτων' Εκδόσεις Παπασωτηρίου, Αθήνα 1995



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ



004000085844

